

Supplementary Data. Interacting residues in the glideosome subcomplexes.

Complex 1				Complex 2				Complex 1f				5vt9				Plasmodium trimeric complex			
TgELC1/TgMyoA	Interface:	1299.5	(Å ²)	TgELC2/TgMyoA	Interface:	1236.9	(Å ²)	TgELC1/TgMyoA	Interface:	1257.1	(Å ²)	TgELC1/TgMyoA	Interface:	1257.1	(Å ²)	PfELC/PfMyoA	Interface:	1421.2	(Å ²)
Salt bridges				Salt bridges				Salt bridges				Salt bridges							
##	TgMyoA	Dist. [Å]	TgELC1	##	TgMyoA	Dist. [Å]	TgELC2	##	TgMyoA	Dist. [Å]	TgELC1	##	TgMyoA	Dist. [Å]	TgELC1	##	PfMyoA	Dist. [Å]	PfELC
1	C:ARG 793[NH1]	3.96	A:GLU 114[OE1]	1	C:ARG 794[NE]	3.97	A:ASP 107[OD2]	1	C:ARG 793[NH1]	3.58	A:GLU 114[OE2]	1	C:ARG 793[NH1]	3.58	A:GLU 114[OE1]	1	C:LYS 792[NZ]	3.86	A:ASP 105[OD1]
2	C:ARG 793[NH2]	2.67	A:GLU 114[OE2]	2	C:ARG 794[NH2]	2.99	A:ASP 107[OD2]	2	C:ARG 793[NH2]	3.30	A:GLU 114[OE1]	2	C:ARG 793[NH2]	3.30	A:GLU 114[OE1]	2	C:LYS 794[NZ]	3.86	A:ILE 134[O]
3	C:ARG 793[NH2]	2.64	A:GLU 114[OE1]	3	C:LYS 796[NZ]	3.13	A:GLU 10[OE1]	3	C:ARG 793[NH2]	3.45	A:GLU 114[OE2]	3	C:ARG 793[NH2]	3.45	A:GLU 114[OE2]	3	C:GLU 785[OE1]	3.16	A:ARG 100[NE]
4	C:ARG 794[NE]	3.01	A:GLU 107[OE2]	4	C:LYS 796[NZ]	2.80	A:GLU 10[OE2]	4	C:ARG 794[NE]	2.98	A:GLU 107[OE2]	4	C:ARG 794[NE]	2.98	A:GLU 107[OE2]	4	C:GLU 785[OE1]	3.49	A:ARG 100[NH2]
5	C:ARG 794[NH2]	3.90	A:GLU 107[OE2]					5	C:ARG 794[NH2]	3.90	A:GLU 107[OE2]	5	C:ARG 794[NH2]	3.90	A:GLU 107[OE2]				
6	C:LYS 796[NZ]	3.10	A:GLU 9[OE1]					6	C:LYS 796[NZ]	3.72	A:GLU 9[OE1]	6	C:LYS 796[NZ]	3.72	A:GLU 9[OE1]				
7	C:LYS 796[NZ]	3.92	A:GLU 9[OE2]					7	C:LYS 796[NZ]	3.06	A:GLU 9[OE2]	7	C:LYS 796[NZ]	3.06	A:GLU 9[OE2]				
Hydrogen bonds				Hydrogen bonds				Hydrogen bonds				Hydrogen bonds							
1	C:TYR 789[OH]	3.01	A:LEU 132[O]	1	C:TYR 790[OH]	3.19	A:GLN 114[OE1]	1	C:TYR 789[OH]	3.30	A:LEU 132[O]	1	C:TYR 789[OH]	3.30	A:LEU 132[O]	1	C:SER 774[OG]	2.96	A:GLN 79[OE1]
2	C:TYR 790[OH]	3.20	A:GLU 114[OE1]	2	C:ARG 793[NH1]	3.61	A:GLN 114[OE1]	2	C:TYR 790[OH]	2.68	A:GLU 114[OE1]	2	C:TYR 790[OH]	2.68	A:GLU 114[OE1]	2	C:LYS 790[NZ]	3.24	A:SER 34[O]
3	C:ARG 793[NH2]	2.67	A:GLU 114[OE2]	3	C:ARG 794[NH2]	2.99	A:ASP 107[OD2]	3	C:ARG 793[NH1]	3.58	A:GLU 114[OE2]	3	C:ARG 793[NH1]	3.58	A:GLU 114[OE2]	3	C:LYS 792[NZ]	3.86	A:ASP 105[OD1]
4	C:ARG 793[NH2]	2.64	A:GLU 114[OE1]	4	C:LYS 796[NZ]	2.80	A:GLU 10[OE2]	4	C:ARG 793[NH2]	3.30	A:GLU 114[OE1]	4	C:ARG 793[NH2]	3.30	A:GLU 114[OE1]	4	C:LYS 794[NZ]	3.00	A:SER 133[O]
5	C:ARG 794[NE]	3.01	A:GLU 107[OE2]	5	C:GLU 787[OE2]	3.04	A:SER 102[N]	5	C:ARG 793[NH2]	3.45	A:GLU 114[OE2]	5	C:ARG 793[NH2]	3.45	A:GLU 114[OE2]	5	C:LYS 794[NZ]	3.86	A:ILE 134[O]
6	C:ARG 794[NH2]	3.30	A:LEU 102[O]	6	C:GLU 787[OE2]	2.79	A:SER 102[OG]	6	C:ARG 794[NE]	2.98	A:GLU 107[OE2]	6	C:ARG 794[NE]	2.98	A:GLU 107[OE2]	6	C:GLU 785[OE1]	3.04	A:ARG 100[N]
7	C:GLU 787[OE1]	3.37	A:GLU 101[N]	7	C:GLU 787[OE2]	3.24	A:SER 101[N]	7	C:ARG 794[NH2]	2.94	A:LEU 102[O]	7	C:ARG 794[NH2]	2.94	A:LEU 102[O]	7	C:TYR 793[OH]	2.41	A:LYS 27[NZ]
8	C:GLU 787[OE1]	2.81	A:LEU 102[N]	8	C:TYR 789[OH]	3.61	A:GLN 114[OE2]	8	C:LYS 796[NZ]	3.06	A:GLU 9[OE2]	8	C:LYS 796[NZ]	3.06	A:GLU 9[OE2]				
9	C:GLU 787[OE1]	2.96	A:LEU 103[N]	9	C:TYR 790[OH]	3.33	A:HIS 110[ND1]	9	C:PRO 781[O]	3.47	A:SER 37[OG]	9	C:PRO 781[O]	3.47	A:SER 37[OG]				
10	C:GLU 787[OE1]	2.62	A:LEU 103[N]					10	C:GLU 787[OE1]	2.77	A:LEU 102[N]	10	C:GLU 787[OE1]	2.77	A:LEU 102[N]				
								11	C:GLU 787[OE1]	3.68	A:LEU 103[N]	11	C:GLU 787[OE1]	3.68	A:LEU 103[N]				
								12	C:GLU 787[OE1]	2.97	A:GLU 101[N]	12	C:GLU 787[OE1]	2.97	A:GLU 101[N]				
								13	C:TYR 789[OH]	3.58	A:ARG 6[NH2]	13	C:TYR 789[OH]	3.58	A:ARG 6[NH2]				

MLC1/TgMyoA				MLC1/TgMyoA				MLC1/TgMyoA				MLC1/TgMyoA				MTIP/PfMyoA			
MLC1/TgMyoA	Interface:	1293.3	(Å ²)	MLC1/TgMyoA	Interface:	1305.2	(Å ²)	MLC1/TgMyoA	Interface:	1311.2	(Å ²)	MLC1/TgMyoA	Interface:	1311.2	(Å ²)	MLC1/TgMyoA	Interface:	1378.5	(Å ²)
Salt bridges				Salt bridges				Salt bridges				Salt bridges				Salt bridges			
##	TgMyoA	Dist. [Å]	MLC1	##	TgMyoA	Dist. [Å]	MLC1	##	TgMyoA	Dist. [Å]	MLC1	##	TgMyoA	Dist. [Å]	MLC1	##	PfMyoA	Dist. [Å]	MTIP
1	C:LYS 802[NZ]	3.94	B:GLU 152[OE1]	1	C:ARG 808[NE]	3.46	B:ASP 145[OD2]	1	C:LYS 802[NZ]	2.70	B:GLU 152[OE1]	1	C:ARG 808[NE]	3.52	A:ASP 145[OD2]	1	C:ARG 806[NE]	3.45	B:ASP 139[OD1]
2	C:ARG 808[NE]	2.70	B:ASP 145[OD1]	2	C:ARG 808[NE]	2.98	B:ASP 145[OD1]	2	C:LYS 802[NZ]	3.68	B:GLU 152[OE2]	2	C:ARG 808[NE]	2.89	A:ASP 145[OD1]	2	C:ARG 806[NE]	2.84	B:ASP 139[OD2]
3	C:ARG 808[NE]	3.41	B:ASP 145[OD2]	3	C:ARG 808[NH2]	2.92	B:ASP 145[OD2]	3	C:ARG 808[NE]	3.56	B:ASP 145[OD2]	3	C:ARG 808[NH1]	2.96	A:ASP 145[OD2]	3	C:ARG 806[NH1]	3.86	B:ASP 110[OD2]
4	C:ARG 808[NH2]	3.59	B:ASP 145[OD1]	4	C:ARG 808[NH2]	3.83	B:ASP 145[OD1]	4	C:ARG 808[NE]	2.86	B:ASP 145[OD1]	4	C:ARG 808[NH1]	3.79	A:ASP 145[OD1]	4	C:ARG 806[NH2]	2.91	B:ASP 139[OD2]
5	C:ARG 808[NH2]	2.72	B:ASP 145[OD2]	5	C:HIS 812[NE2]	2.75	B:ASP 145[OD2]	5	C:ARG 808[NH2]	2.87	B:ASP 145[OD2]	5	C:HIS 812[NE2]	2.61	A:ASP 145[OD2]	5	C:HIS 810[NE2]	3.05	B:ASP 139[OD2]
6	C:HIS 812[ND1]	3.56	B:GLU 212[OE1]	6	C:ARG 814[NE]	3.50	B:GLU 185[OE1]	6	C:ARG 808[NH2]	3.72	B:ASP 145[OD1]	6	C:ARG 814[NE]	3.51	A:GLU 185[OE1]	6	C:ARG 812[NH1]	3.11	B:GLU 179[OE1]
7	C:HIS 812[NE2]	2.59	B:ASP 145[OD2]	7	C:ARG 814[NE]	2.88	B:GLU 185[OE2]	7	C:HIS 812[ND1]	3.33	B:GLU 212[OE1]	7	C:ARG 814[NE]	2.87	A:GLU 185[OE2]	7	C:ARG 812[NH1]	3.53	B:GLU 179[OE2]
8	C:ARG 814[NE]	3.24	B:GLU 185[OE1]	8	C:ARG 814[NH2]	3.02	B:GLU 185[OE1]	8	C:HIS 812[NE2]	2.90	B:ASP 145[OD2]	8	C:ARG 814[NH2]	2.85	A:GLU 185[OE1]	8	C:LYS 814[NZ]	2.92	B:ASP 201[OD2]
9	C:ARG 814[NE]	2.82	B:GLU 185[OE2]	9	C:ARG 814[NH2]	3.80	B:GLU 185[OE2]	9	C:ARG 814[NE]	2.63	B:GLU 185[OE2]	9	C:ARG 814[NH2]	2.85	A:GLU 185[OE1]				
10	C:ARG 814[NH2]	2.72	B:GLU 185[OE1]	10	C:HIS 816[NE2]	3.04	B:GLU 192[OE1]	10	C:ARG 814[NE]	3.60	B:GLU 185[OE1]	10	C:ARG 814[NH2]	3.73	A:GLU 185[OE2]				
11	C:ARG 814[NH2]	3.76	B:GLU 185[OE2]	11	C:HIS 816[NE2]	3.21	B:GLU 192[OE2]	11	C:ARG 814[NH2]	3.59	B:GLU 185[OE2]	11	C:ARG 814[NH2]	3.73	A:GLU 185[OE2]				
12	C:ARG 815[NE]	3.03	B:GLU 212[OE1]					12	C:ARG 814[NH2]	3.05	B:GLU 185[OE1]	12	C:ARG 814[NH2]	2.85	B:GLU 185[OE1]				
13	C:ARG 815[NH2]	3.90	B:GLU 212[OE1]					13	C:ARG 815[NE]	2.95	B:GLU 212[OE1]	13	C:ARG 814[NH2]	2.85	B:GLU 185[OE1]				
								14	C:ARG 815[NH2]	3.71	B:GLU 212[OE1]	14	C:ARG 814[NH2]	2.85	B:GLU 185[OE1]				
Hydrogen bonds				Hydrogen bonds				Hydrogen bonds				Hydrogen bonds				Hydrogen bonds			
1	C:ARG 808[NE]	2.70	B:ASP 145[OD1]	1	C:ARG 808[NE]	2.98	B:ASP 145[OD1]	1	C:LYS 802[NZ]	2.70	B:GLU 152[OE1]	1	C:ARG 808[NE]	2.89	A:ASP 145[OD1]	1	C:SER 803[OG]	3.07	B:LEU 144[O]
2	C:ARG 808[NH1]	2.99	B:ALA 111[O]	2	C:ARG 808[NH1]	2.95	B:ALA 111[O]	2	C:ARG 808[NE]	2.86	B:ASP 145[OD1]	2	C:ARG 808[NH1]	2.96	A:ASP 145[OD2]	2	C:ARG 806[NE]	2.84	B:ASP 139[OD2]
3	C:ARG 808[NH2]	2.72	B:ASP 145[OD2]	3	C:ARG 808[NH2]	2.92	B:ASP 145[OD2]	3	C:ARG 808[NH1]	2.87	B:ALA 111[O]	3	C:ARG 808[NH2]	2.79	A:ALA 111[O]	3	C:ARG 806[NH1]	3.13	B:ALA 105[O]
4	C:ARG 808[NH2]	2.93	B:ALA 111[O]	4	C:ARG 808[NH2]	2.86	B:ALA 111[O]	4	C:ARG 808[NH2]	2.87	B:ALA 111[O]	4	C:ARG 808[NH2]	2.87	A:ALA 111[O]	4	C:ARG 806[NH1]	3.86	B:ASP 110[OD2]
5	C:GLN 810[NE2]	2.92	B:TYR 177[O]	5	C:GLN 810[NE2]	2.88	B:LEU 174[O]	5	C:ARG 808[NH2]	2.97	B:ALA 111[O]	5	C:GLN 810[NE2]	2.82	A:TYR 177[O]	5	C:ARG 806[NH2]	2.91	B:ASP 139[OD2]
6	C:GLN 810[NE2]	2.90	B:LEU 174[O]	6	C:ARG 814[NE]	2.88	B:GLU 185[OE2]	6	C:ARG 808[NH2]	2.87	B:ALA 111[O]	6	C:GLN 810[NE2]	2.96	A:LEU 174[O]	6	C:ARG 806[NH2]	2.85	B:ALA 105[O]
7	C:HIS 812[NE2]	2.59	B:ASP 145[OD2]	7	C:HIS 812[NE2]	2.75	B:ASP 145[OD2]	7	C:ARG 814[NE]	3.01	B:GLU 179[O]	7	C:HIS 812[ND1]	3.48	A:MET 208[O]	7	C:GLN 808[NE2]	2.68	B:TRP 171[O]
8	C:ARG 814[NE]	2.82	B:GLU 185[OE2]	8	C:ARG 814[NH2]	2.88	B:GLU 185[OE2]	8	C:ARG 814[NH1]	3.01	B:GLU 179[O]	8	C:HIS 812[NE2]	2.61	A:ASP 145[OD2]	8	C:GLN 810[NE2]	3.06	B:LEU 168[O]
9	C:ARG 814[NE]	3.69	B:TYR 114[OH]	9	C:ARG 814[NH2]	3.02	B:GLU 185[OE1]	9	C:ARG 814[NH2]	3.02	B:GLU 185[OE1]	9	C:ARG 814[NE]	2.87	A:GLU 185[OE2]	9	C:ARG 812[NH1]	3.11	B:GLU 179[OE1]
10	C:ARG 814[NH1]	3.01	B:GLU 179[O]	10	C:ARG 814[NH2]	3.02	B:GLU 185[OE1]	10	C:ARG 814[NE]	2.63	B:GLU 185[OE2]	10	C:ARG 814[NH2]	2.85	A:PRO 180[O]	10	C:ARG 812[NH2]	2.62	B:ASP 173[O]
11	C:ARG 814[NH2]	3.08	B:PRO 180[O]	11	C:ARG 814[NH2]	3.11	B:GLU 179[O]	11	C:ARG 814[NH2]	3.59	B:GLU 185[OE2]	11	C:ARG 814[NH2]	2.85	A:PRO 180[O]	11	C:ARG 812[NH2]	3.42	B:ALA 174[O]
12	C:ARG 814[NH2]	2.72	B:GLU 185[OE1]	12	C:ARG 814[NH2]	2.75	B:PRO 180[O]	12	C:ARG 814[NH2]	3.05	B:GLU 185[OE1]	12	C:ARG 814[NH2]	2.85	A:GLU 185[OE1]	12	C:LYS 813[NZ]	3.36	B:LEU 203[O]
13	C:ARG 815[NE]	3.03	B:GLU 212[OE1]	13	C:ARG 815[NH1]	3.70													