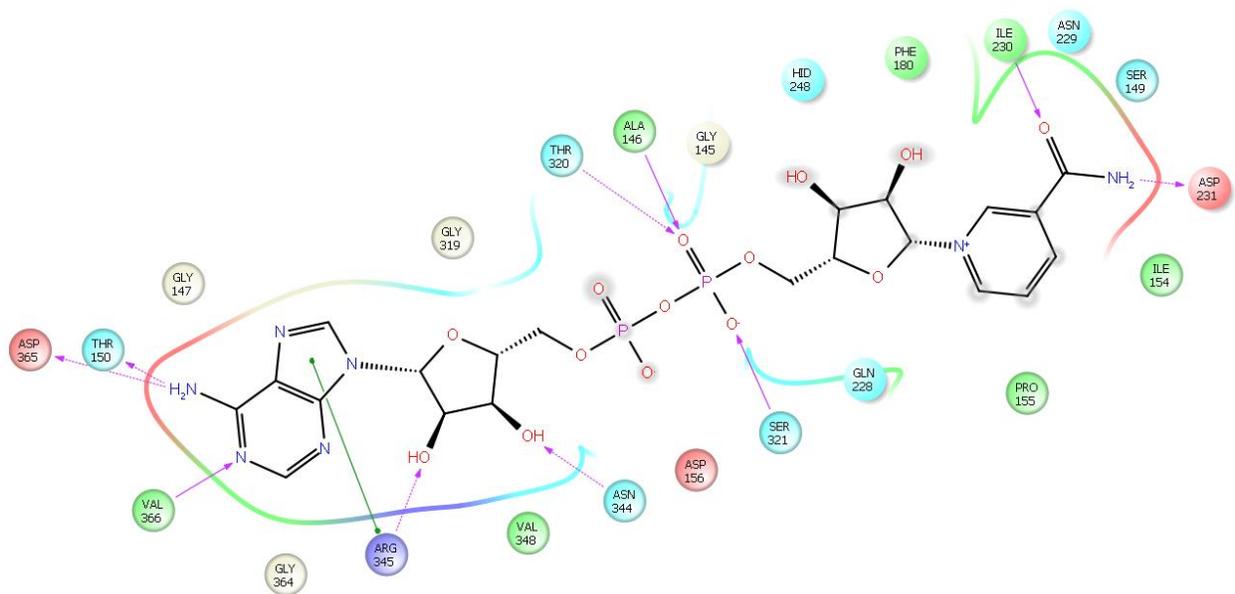
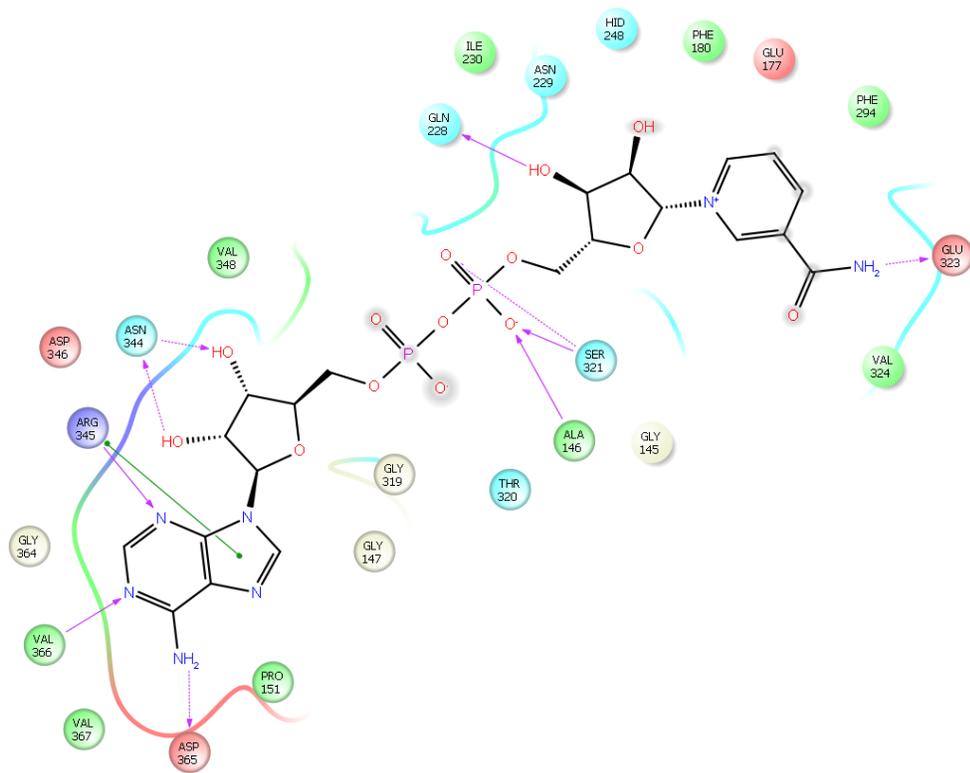


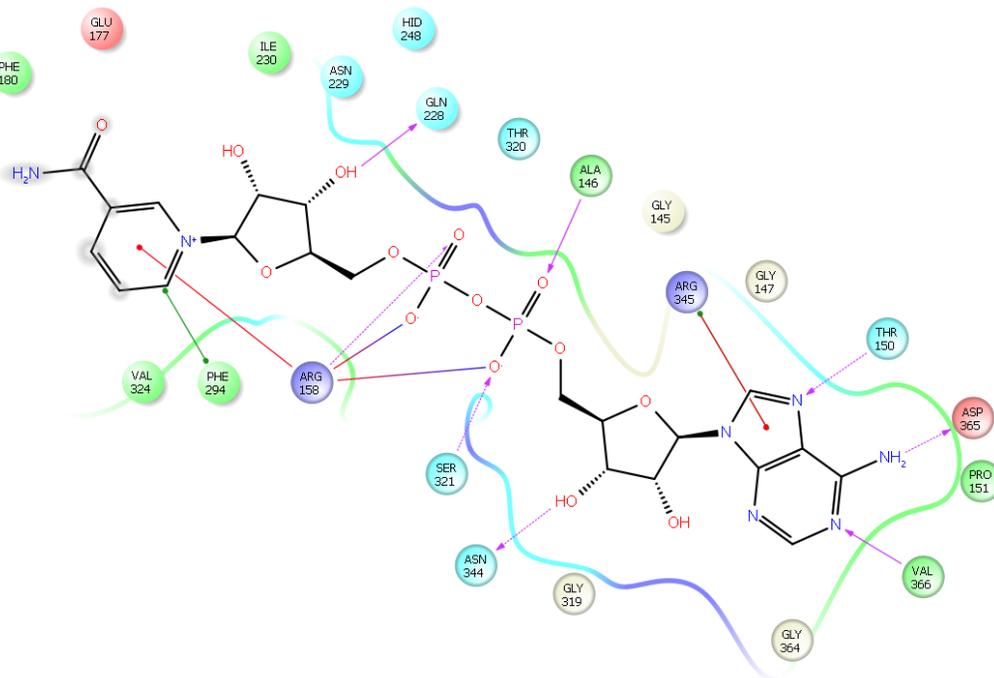
4FVT_Xtal



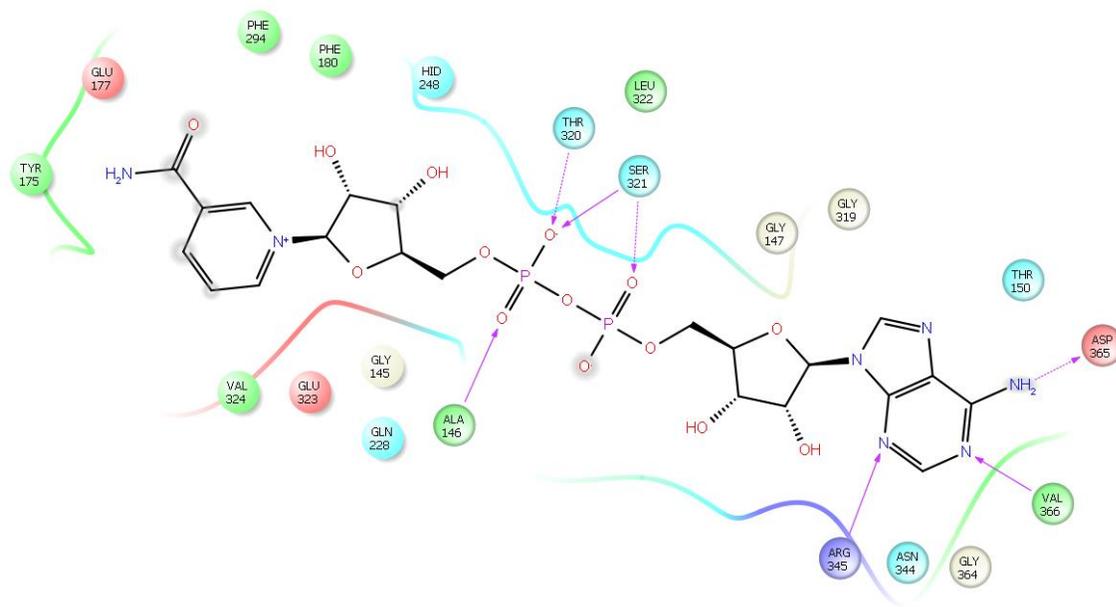
4FVT_MD



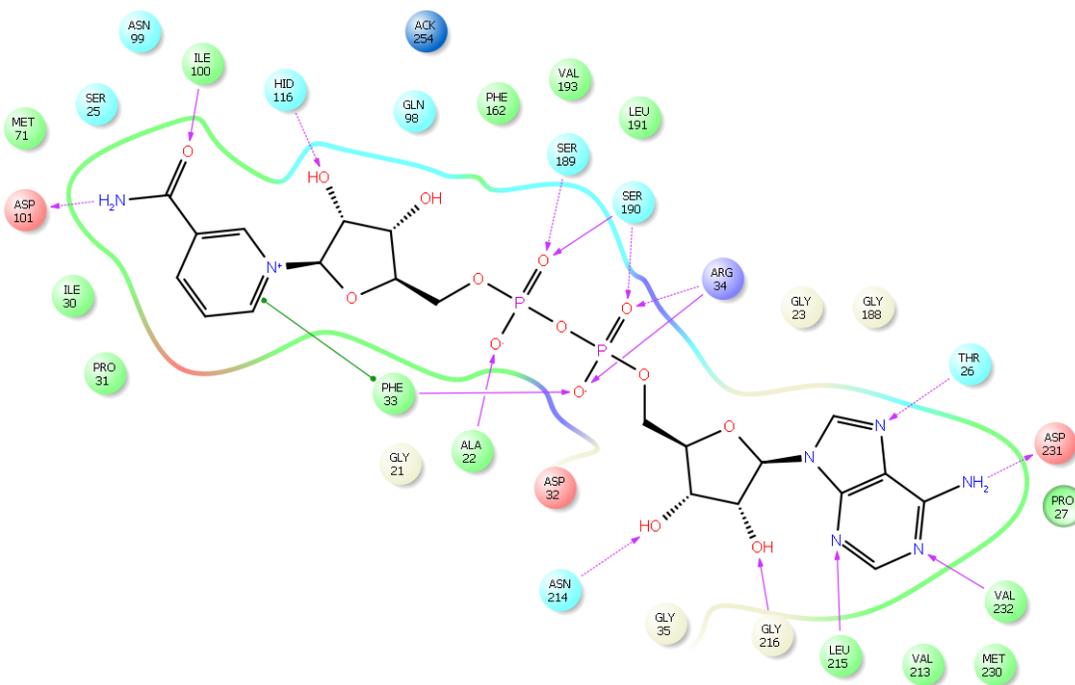
SIRT3 w/ NAM



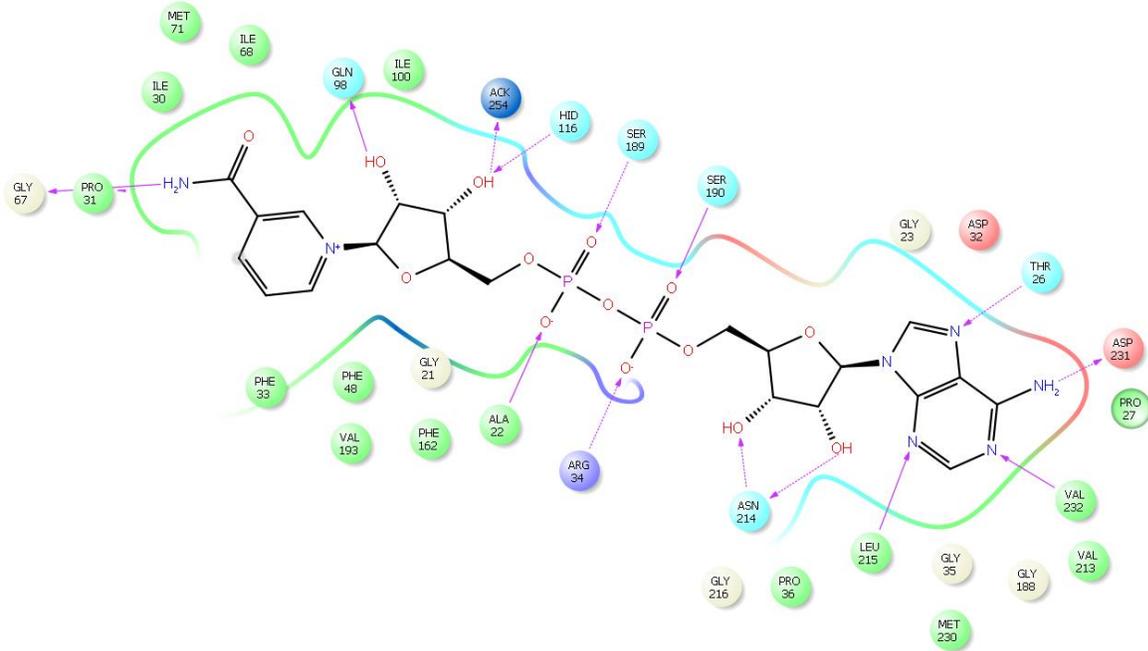
SIRT3 w/ isoNAM



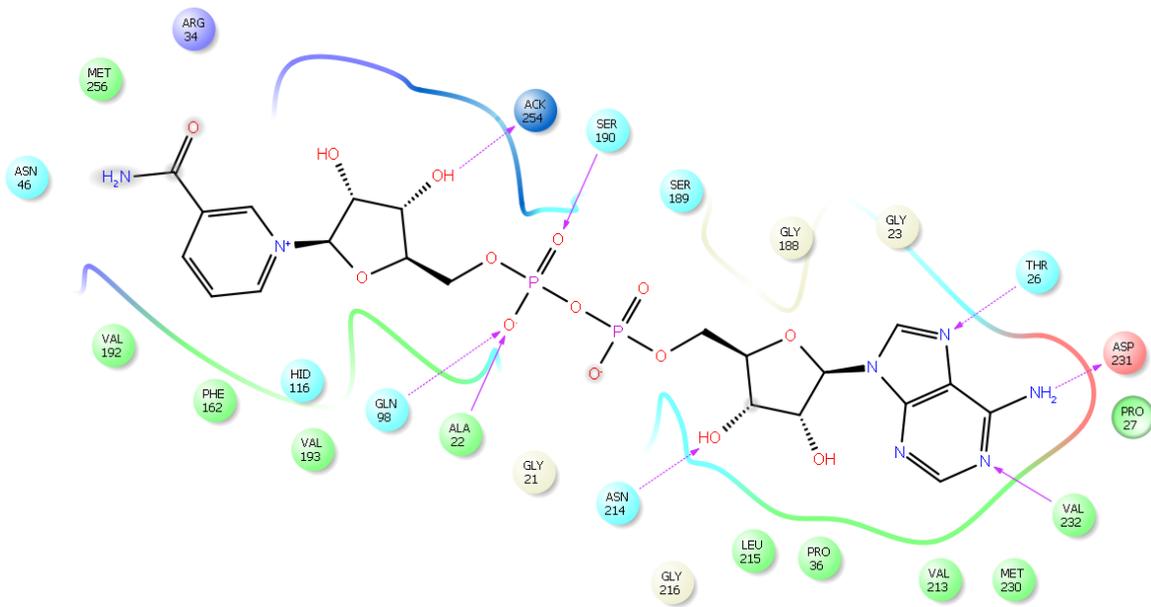
SIRT3 Binary



2H4F_Xtal



2H4F_MD



2H4F w/ NAM

Residues in contact with NAD+ in the complexes (using a cutoff distance of 3.50 Å)

Residues in Contact	4FVT (Xtal)	SIRT3 Ternary	SIRT3 w/ NAM	SIRT3 w/ isoNAM	SIRT3 Binary	Residues in Contact	2H4F (Xtal)	Sir2TM Ternary	Sir2TM w/ NAM	Sir2TM Binary
GLY145	Y	Y	Y	Y	Y	GLY21	Y	Y	Y	Y
ALA146	Y	Y	Y	Y	Y	ALA22	Y	Y	Y	Y
GLY147	Y	Y	Y	Y	Y	GLY23	Y	Y	Y	Y
SER149	Y	Y	-	-	-	SER25	Y	-	-	Y
THR150	Y	Y	-	Y	Y	THR26	Y	Y	Y	Y
PRO151	Y	-	Y	Y	-	PRO27	Y	Y	Y	Y
ILE154	Y	Y	-	-	-	ILE30	Y	Y	-	Y
PRO155	Y	Y	-	-	-	PRO31	Y	Y	-	Y
ASP156	Y	Y	-	-	-	ASP32	Y	Y	-	Y
PHE157	Y	-	-	-	-	PHE33	Y	Y	-	Y
ARG158	-	-	-	Y	-	ARG34	Y	Y	Y	Y
TYR175	-	-	-	-	Y	GLY35	Y	Y	-	-
GLU177	-	-	Y	Y	Y	PRO36	-	Y	Y	-
PHE180	Y	-	Y	Y	Y	ASN46	-	-	Y	-
GLN228	Y	Y	Y	Y	Y	PHE48	-	Y	-	-
ASN229	Y	Y	Y	Y	-	GLY67	-	Y	-	-
ILE230	Y	Y	Y	Y	-	ILE68	-	Y	-	-
ASP231	Y	Y	-	-	-	MET71	Y	Y	-	-
HIS248	Y	Y	Y	Y	Y	GLN98	Y	Y	Y	Y
PHE294	Y	-	Y	Y	Y	ASN99	Y	-	-	Y
GLY319	Y	Y	Y	Y	Y	ILE100	Y	Y	-	Y
THR320	Y	Y	-	Y	Y	ASP101	Y	-	-	Y
SER321	Y	Y	-	Y	Y	HIS116	Y	Y	Y	Y
LEU322	Y	-	-	-	Y	PHE162	Y	Y	Y	-
GLU323	-	-	Y	-	Y	GLLY188	Y	Y	Y	Y
VAL324	Y	-	Y	Y	Y	SER189	Y	Y	Y	Y
ASN344	Y	Y	Y	Y	Y	SER190	Y	Y	Y	Y
ARG345	Y	Y	Y	Y	Y	LEU191	Y	-	-	-
ASP346	-	-	Y	-	-	VAL192	-	-	Y	-
VAL348	-	Y	Y	-	-	VAL193	Y	Y	Y	-
GLY364	Y	Y	Y	Y	Y	VAL213	Y	Y	Y	-
ASP365	Y	Y	Y	Y	Y	ASN214	Y	Y	Y	Y
VAL366	Y	Y	Y	Y	Y	LEU215	Y	Y	Y	Y
VAL367	-	-	Y	-	-	GLY216	Y	Y	Y	Y
Ac-LYS	Y	Y	Y	Y	-	MET230	Y	Y	Y	Y
						ASP231	Y	Y	Y	Y
						VAL232	Y	Y	Y	Y
						MET256	-	-	Y	-
						AC-LYS	Y	Y	Y	-

“Y”: In contact with NAD+; “-”: No in contact with NAD+