

Table S2. Mass isotopomer distributions of TBDMS-amino acids resulting from growth on [1,4-¹³C]fumarate

AA	Frag	C	x+	Wild type			NifA*			
				Ave	<i>sim</i>	SD	Ave	<i>sim</i>	SD	
Ala	M-57	1-3	0	0.063	<i>0.065</i>	0.007	0.143	<i>0.135</i>	0.003	
			1	0.810	<i>0.811</i>	0.006	0.800	<i>0.801</i>	0.002	
			2	0.059	<i>0.055</i>	0.000	0.042	<i>0.039</i>	0.000	
			3	0.067	<i>0.067</i>	0.001	0.016	<i>0.014</i>	0.001	
	M-85	2-3	0	0.863	<i>0.864</i>	0.001	0.929	<i>0.929</i>	0.001	
			1	0.060	<i>0.055</i>	0.000	0.050	<i>0.047</i>	0.000	
Gly	M-85	2	0	0.857	<i>0.857</i>	0.002	0.944	<i>0.944</i>	0.002	
			1	0.143	<i>0.139</i>	0.002	0.056	<i>0.051</i>	0.002	
	M-57	1-2	0	0.067	<i>0.066</i>	0.009	0.149	<i>0.144</i>	0.002	
			1	0.806	<i>0.806</i>	0.007	0.809	<i>0.810</i>	0.001	
			2	0.127	<i>0.127</i>	0.002	0.042	<i>0.040</i>	0.001	
Val	M-85	2-5	0	0.750	<i>0.751</i>	0.001	0.870	<i>0.869</i>	0.002	
			1	0.098	<i>0.096</i>	0.003	0.083	<i>0.088</i>	0.001	
			2	0.134	<i>0.131</i>	0.002	0.043	<i>0.035</i>	0.001	
			3	0.010	<i>0.008</i>	0.003	0.004	<i>0.002</i>	0.000	
			4	0.009	<i>0.005</i>	0.000	0.001	<i>0.000</i>	0.000	
	M-159	2-5	0	0.743	<i>0.744</i>	0.002	0.862	<i>0.862</i>	0.001	
			1	0.100	<i>0.095</i>	0.001	0.085	<i>0.087</i>	0.000	
			2	0.129	<i>0.129</i>	0.002	0.040	<i>0.035</i>	0.001	
			3	0.018	<i>0.008</i>	0.001	0.011	<i>0.002</i>	0.000	
			4	0.010	<i>0.005</i>	0.000	0.003	<i>0.000</i>	0.000	
	M-57	1-5	0	0.057	<i>0.057</i>	0.008	0.134	<i>0.127</i>	0.003	
			1	0.713	<i>0.712</i>	0.005	0.762	<i>0.763</i>	0.005	
			2	0.096	<i>0.098</i>	0.003	0.070	<i>0.078</i>	0.005	
			3	0.118	<i>0.122</i>	0.001	0.031	<i>0.029</i>	0.002	
			4	0.009	<i>0.008</i>	0.000	0.002	<i>0.001</i>	0.000	
			5	0.007	<i>0.005</i>	0.000	0.001	<i>0.000</i>	0.000	
	Leu	M-85	2-6	0	0.680	<i>0.678</i>	0.003	0.835	<i>0.834</i>	0.003
				1	0.164	<i>0.167</i>	0.001	0.118	<i>0.126</i>	0.001
2				0.122	<i>0.128</i>	0.002	0.039	<i>0.038</i>	0.002	
3				0.025	<i>0.021</i>	0.000	0.006	<i>0.003</i>	0.000	
4				0.008	<i>0.006</i>	0.000	0.001	<i>0.000</i>	0.000	
M-159		2-6	0	0.670	<i>0.670</i>	0.002	0.824	<i>0.824</i>	0.002	
			1	0.162	<i>0.165</i>	0.000	0.119	<i>0.124</i>	0.000	
			2	0.131	<i>0.127</i>	0.001	0.048	<i>0.037</i>	0.001	
			3	0.027	<i>0.021</i>	0.000	0.007	<i>0.003</i>	0.000	
			4	0.009	<i>0.006</i>	0.000	0.002	<i>0.000</i>	0.000	
			5	0.001	<i>0.001</i>	0.001	0.000	<i>0.000</i>	0.000	

Ile	M-85	2-6	0	0.628	<i>0.628</i>	0.003	0.726	<i>0.727</i>	0.003	
			1	0.211	<i>0.210</i>	0.002	0.220	<i>0.220</i>	0.001	
			2	0.122	<i>0.124</i>	0.001	0.044	<i>0.042</i>	0.002	
			3	0.029	<i>0.025</i>	0.000	0.008	<i>0.006</i>	0.000	
			4	0.008	<i>0.005</i>	0.000	0.002	<i>0.000</i>	0.000	
	M-159	2-6	5	0.002	<i>0.001</i>	0.000	0.000	<i>0.000</i>	0.000	
			0	0.630	<i>0.630</i>	0.002	0.725	<i>0.725</i>	0.003	
			1	0.207	<i>0.210</i>	0.001	0.218	<i>0.220</i>	0.003	
			2	0.125	<i>0.124</i>	0.001	0.047	<i>0.041</i>	0.002	
			3	0.030	<i>0.025</i>	0.000	0.026	<i>0.006</i>	0.034	
	4	0.008	<i>0.006</i>	0.000	0.005	<i>0.000</i>	0.007			
	5	-0.001	<i>0.001</i>	0.001	0.000	<i>0.000</i>	0.000			
	Ser	M-57	1-3	0	0.064	<i>0.058</i>	0.008	0.142	<i>0.135</i>	0.003
				1	0.725	<i>0.725</i>	0.007	0.778	<i>0.779</i>	0.001
				2	0.148	<i>0.150</i>	0.002	0.066	<i>0.070</i>	0.002
3				0.062	<i>0.064</i>	0.001	0.013	<i>0.016</i>	0.001	
M-85		2-3	0	0.766	<i>0.767</i>	0.003	0.899	<i>0.899</i>	0.003	
			1	0.163	<i>0.158</i>	0.001	0.084	<i>0.082</i>	0.002	
			2	0.071	<i>0.069</i>	0.002	0.018	<i>0.020</i>	0.001	
M-159		2-3	0	0.773	<i>0.773</i>	0.003	0.900	<i>0.900</i>	0.002	
			1	0.156	<i>0.159</i>	0.001	0.081	<i>0.082</i>	0.002	
f302		1-2	2	0.070	<i>0.070</i>	0.002	0.019	<i>0.020</i>	0.001	
			0	0.083	<i>0.065</i>	0.008	0.158	<i>0.142</i>	0.003	
			1	0.790	<i>0.792</i>	0.006	0.797	<i>0.800</i>	0.002	
2		0.127	<i>0.125</i>	0.003	0.044	<i>0.040</i>	0.001			
Phe		M-57	1-9	0	0.055	<i>0.001</i>	0.012	0.048	<i>0.010</i>	0.006
				1	0.025	<i>0.020</i>	0.001	0.111	<i>0.113</i>	0.002
	2			0.170	<i>0.176</i>	0.001	0.381	<i>0.380</i>	0.005	
	3			0.452	<i>0.444</i>	0.008	0.354	<i>0.349</i>	0.004	
	4			0.127	<i>0.138</i>	0.002	0.068	<i>0.089</i>	0.001	
	5			0.127	<i>0.137</i>	0.003	0.029	<i>0.030</i>	0.001	
	6			0.024	<i>0.022</i>	0.001	0.006	<i>0.004</i>	0.000	
	7			0.017	<i>0.013</i>	0.001	0.003	<i>0.001</i>	0.000	
	8			0.002	<i>0.001</i>	0.000	0.001	<i>0.000</i>	0.000	
	9	0.001	<i>0.000</i>	0.000	0.000	<i>0.000</i>	0.000			
	f302	1-2	0	0.118	<i>0.065</i>	0.011	0.179	<i>0.139</i>	0.006	
			1	0.802	<i>0.806</i>	0.011	0.792	<i>0.799</i>	0.006	
			2	0.080	<i>0.082</i>	0.001	0.029	<i>0.027</i>	0.001	
	M-159	2-9	0	0.066	<i>0.009</i>	0.012	0.100	<i>0.068</i>	0.006	
			1	0.157	<i>0.151</i>	0.002	0.381	<i>0.381</i>	0.003	
			2	0.463	<i>0.461</i>	0.007	0.396	<i>0.395</i>	0.004	
			3	0.129	<i>0.136</i>	0.002	0.077	<i>0.101</i>	0.001	
			4	0.136	<i>0.144</i>	0.004	0.035	<i>0.036</i>	0.001	
			5	0.027	<i>0.023</i>	0.002	0.008	<i>0.004</i>	0.000	
			6	0.018	<i>0.014</i>	0.000	0.003	<i>0.001</i>	0.000	
			7	0.003	<i>0.001</i>	0.000	0.001	<i>0.000</i>	0.000	

			8	0.002	<i>0.000</i>	0.000	0.000	<i>0.000</i>	0.000	
Asx	M-57	1-4	0	0.045	<i>0.054</i>	0.010	0.109	<i>0.107</i>	0.002	
			1	0.042	<i>0.035</i>	0.000	0.071	<i>0.071</i>	0.001	
			2	0.886	<i>0.886</i>	0.009	0.801	<i>0.801</i>	0.003	
			3	0.022	<i>0.027</i>	0.000	0.019	<i>0.023</i>	0.000	
			4	0.005	<i>0.010</i>	0.001	0.001	<i>0.003</i>	0.000	
	M-85	2-4	0	0.061	<i>0.073</i>	0.010	0.139	<i>0.142</i>	0.003	
			1	0.910	<i>0.909</i>	0.010	0.838	<i>0.837</i>	0.003	
			2	0.024	<i>0.029</i>	0.001	0.022	<i>0.026</i>	0.001	
			3	0.005	<i>0.011</i>	0.001	0.001	<i>0.004</i>	0.000	
			M-159	2-4	0	0.061	<i>0.072</i>	0.010	0.139	<i>0.141</i>
	f302	1-2	1	0.905	<i>0.904</i>	0.009	0.832	<i>0.832</i>	0.003	
			2	0.026	<i>0.029</i>	0.000	0.024	<i>0.026</i>	0.001	
			3	0.009	<i>0.011</i>	0.001	0.005	<i>0.004</i>	0.000	
			0	0.064	<i>0.072</i>	0.010	0.142	<i>0.143</i>	0.002	
1			0.915	<i>0.914</i>	0.010	0.842	<i>0.842</i>	0.003		
			2	0.021	<i>0.025</i>	0.000	0.016	<i>0.015</i>	0.001	
Glx	M-57	1-4	0	0.069	<i>0.061</i>	0.009	0.146	<i>0.128</i>	0.002	
			1	0.764	<i>0.764</i>	0.008	0.762	<i>0.765</i>	0.002	
			2	0.092	<i>0.092</i>	0.001	0.071	<i>0.070</i>	0.000	
			3	0.073	<i>0.073</i>	0.000	0.020	<i>0.019</i>	0.001	
			4	0.002	<i>0.003</i>	0.000	0.000	<i>0.001</i>	0.000	
	M-159	2-4	5	0.000	<i>0.001</i>	0.000	0.000	<i>0.000</i>	0.000	
			0	0.820	<i>0.820</i>	0.003	0.889	<i>0.889</i>	0.001	
			1	0.097	<i>0.096</i>	0.001	0.084	<i>0.082</i>	0.001	
			2	0.079	<i>0.080</i>	0.001	0.025	<i>0.023</i>	0.000	
			3	0.003	<i>0.003</i>	0.000	0.001	<i>0.001</i>	0.000	
				4	0.001	<i>0.001</i>	0.000	0.000	<i>0.000</i>	0.000
	Tyr	f302	1-2	0	0.066	<i>0.069</i>	0.009	0.145	<i>0.143</i>	0.003
				1	0.846	<i>0.846</i>	0.008	0.823	<i>0.824</i>	0.002
				2	0.088	<i>0.087</i>	0.001	0.032	<i>0.028</i>	0.001

Values are corrected for the natural abundances of all atoms except for the carbons in the amino acid backbones. AA: amino acid; Frag: fragment; C: Carbons in fragment; x+: increase in mass due to ^{13}C incorporation and is equal to the number of ^{13}C atoms in the amino acid fragment backbone; Ave: average fraction of the amino acid fragment having the specified mass; sim: simulated fraction of the amino acid fragment having the specified mass from the optimized fit; SD: measured mass isotopomer standard deviation; Asx: aspartate and asparagine; Glx: glutamate and glutamine.