

**Table S3. Mass isotopomer distributions of TBDMS-amino acids resulting from growth on [1,4-<sup>13</sup>C]succinate**

AA	Frag	C	x+	Wild type			NifA*						
				Ave	<i>sim</i>	SD	Ave	<i>sim</i>	SD				
Ala	M-57	1-3	0	0.052	0.046	0.004	0.075	0.066	0.005				
			1	0.732	0.733	0.003	0.765	0.766	0.006				
			2	0.069	0.068	0.001	0.068	0.065	0.001				
			3	0.148	0.145	0.007	0.092	0.089	0.003				
	M-85	2-3	0	0.772	0.773	0.006	0.826	0.827	0.004				
			1	0.066	0.066	0.001	0.068	0.066	0.002				
			2	0.163	0.156	0.006	0.106	0.099	0.003				
			<hr/>										
			Gly	M-85	2	0	0.714	0.711	0.008	0.800	0.799	0.004	
	M-57	1-2	1	0.287	0.292	0.008	0.200	0.203	0.004				
			0	0.059	0.046	0.003	0.079	0.069	0.004				
			1	0.680	0.678	0.008	0.746	0.745	0.007				
			2	0.262	0.269	0.009	0.176	0.182	0.004				
			<hr/>										
Val	M-85	2-5	0	0.607	0.605	0.007	0.063	0.055	0.004				
			1	0.096	0.103	0.001	0.653	0.652	0.008				
			2	0.248	0.249	0.007	0.108	0.113	0.002				
			3	0.022	0.021	0.000	0.152	0.157	0.004				
			4	0.027	0.025	0.002	0.013	0.013	0.001				
	M-159	2-5	0	0.604	0.602	0.009	0.011	0.009	0.001				
			1	0.098	0.103	0.002	0.698	0.697	0.007				
			2	0.243	0.247	0.008	0.107	0.110	0.002				
			3	0.027	0.021	0.001	0.172	0.171	0.005				
			4	0.028	0.025	0.002	0.011	0.013	0.001				
	M-57	1-5	0	0.041	0.036	0.003	0.013	0.010	0.001				
			1	0.582	0.579	0.006	0.691	0.690	0.006				
			2	0.104	0.110	0.002	0.107	0.109	0.002				
			3	0.229	0.235	0.008	0.167	0.170	0.004				
			4	0.019	0.020	0.001	0.021	0.013	0.001				
				5	0.024	0.023	0.002	0.014	0.010	0.001			
				<hr/>									
				Leu	M-85	2-6	0	0.502	0.493	0.009	0.611	0.605	0.010
							1	0.190	0.201	0.001	0.182	0.192	0.003
2							0.214	0.223	0.003	0.156	0.164	0.005	
3	0.064	0.065	0.003				0.037	0.035	0.001				
4	0.025	0.024	0.002				0.013	0.010	0.000				
			5	0.006	0.005	0.001	0.002	0.001	0.000				
			M-159	2-6	0	0.496	0.490	0.010	0.603	0.600	0.008		
					1	0.188	0.200	0.001	0.180	0.190	0.002		
					2	0.219	0.221	0.004	0.162	0.162	0.004		
					3	0.065	0.065	0.003	0.039	0.035	0.002		
4	0.026	0.024			0.002	0.014	0.010	0.001					
			5	0.006	0.005	0.001	0.002	0.001	0.000				

Ile	M-85	2-6	0	0.467	0.466	0.008	0.567	0.566	0.010	
			1	0.225	0.223	0.003	0.223	0.223	0.004	
			2	0.208	0.214	0.006	0.153	0.158	0.004	
			3	0.070	0.069	0.003	0.042	0.039	0.002	
			4	0.023	0.023	0.002	0.012	0.010	0.001	
	M-159	2-6	5	0.006	0.005	0.001	0.003	0.001	0.000	
			0	0.469	0.466	0.010	0.566	0.565	0.008	
			1	0.221	0.223	0.002	0.220	0.223	0.004	
			2	0.210	0.214	0.005	0.155	0.158	0.004	
			3	0.071	0.069	0.003	0.043	0.039	0.002	
	4	0.024	0.023	0.002	0.013	0.010	0.001			
	5	0.005	0.005	0.002	0.003	0.001	0.001			
	Ser	M-57	1-3	0	0.051	0.037	0.004	0.069	0.059	0.002
				1	0.572	0.573	0.011	0.656	0.656	0.007
				2	0.200	0.203	0.002	0.169	0.172	0.002
3				0.177	0.175	0.008	0.107	0.106	0.003	
M-85		2-3	0	0.589	0.595	0.014	0.692	0.694	0.007	
			1	0.215	0.205	0.008	0.185	0.179	0.005	
			2	0.196	0.187	0.007	0.123	0.118	0.002	
M-159		2-3	0	0.599	0.600	0.012	0.703	0.702	0.008	
			1	0.205	0.207	0.004	0.177	0.181	0.005	
f302		1-2	2	0.196	0.189	0.008	0.120	0.119	0.004	
			0	0.073	0.045	0.006	0.094	0.068	0.001	
			1	0.668	0.668	0.009	0.730	0.732	0.004	
2		0.259	0.265	0.007	0.177	0.178	0.003			
Phe		M-57	1-9	0	0.045	0.000	0.016	0.060	0.001	0.005
				1	0.016	0.005	0.000	0.028	0.017	0.001
	2			0.085	0.070	0.007	0.154	0.137	0.004	
	3			0.324	0.321	0.013	0.372	0.365	0.004	
	4			0.142	0.146	0.004	0.145	0.163	0.002	
	5			0.253	0.258	0.003	0.168	0.180	0.004	
	6			0.057	0.060	0.001	0.037	0.040	0.003	
	7			0.065	0.063	0.005	0.030	0.026	0.001	
	8			0.007	0.007	0.001	0.003	0.003	0.000	
	9			0.006	0.005	0.002	0.003	0.001	0.001	
	f302	1-2	0	0.095	0.050	0.013	0.130	0.069	0.007	
			1	0.740	0.742	0.017	0.761	0.767	0.007	
			2	0.165	0.169	0.004	0.109	0.110	0.005	
	M-159	2-9	0	0.052	0.002	0.015	0.072	0.008	0.005	
			1	0.078	0.053	0.005	0.141	0.115	0.004	
			2	0.327	0.326	0.014	0.385	0.380	0.005	
			3	0.138	0.137	0.005	0.145	0.161	0.003	
			4	0.260	0.268	0.005	0.178	0.192	0.005	
			5	0.059	0.060	0.001	0.041	0.041	0.002	
			6	0.071	0.067	0.005	0.032	0.029	0.001	
	7	0.008	0.007	0.000	0.004	0.003	0.000			

			8	0.007	0.005	0.001	0.002	0.001	0.000	
Asx	M-57	1-4	0	0.044	0.045	0.002	0.058	0.057	0.003	
			1	0.032	0.023	0.002	0.040	0.035	0.003	
			2	0.897	0.896	0.005	0.875	0.874	0.008	
			3	0.021	0.029	0.000	0.022	0.029	0.001	
			4	0.007	0.022	0.001	0.005	0.015	0.000	
	M-85	2-4	0	0.048	0.056	0.003	0.068	0.074	0.005	
			1	0.921	0.920	0.005	0.901	0.900	0.007	
			2	0.025	0.035	0.001	0.025	0.034	0.001	
			3	0.007	0.024	0.002	0.006	0.017	0.001	
			0	0.046	0.056	0.004	0.068	0.073	0.005	
	M-159	2-4	1	0.916	0.915	0.005	0.894	0.894	0.006	
			2	0.027	0.035	0.001	0.027	0.034	0.001	
			3	0.011	0.024	0.001	0.010	0.017	0.000	
			0	0.052	0.062	0.004	0.073	0.079	0.006	
1			0.916	0.915	0.005	0.901	0.900	0.006		
f302	1-2	2	0.032	0.042	0.001	0.026	0.034	0.000		
		0	0.043	0.041	0.004	0.064	0.057	0.007		
		1	0.671	0.675	0.002	0.696	0.701	0.008		
Glx	M-57	1-4	2	0.117	0.107	0.003	0.120	0.109	0.001	
			3	0.164	0.156	0.004	0.116	0.100	0.005	
			4	0.005	0.007	0.000	0.004	0.004	0.000	
			5	0.001	0.004	0.000	0.001	0.002	0.000	
			0	0.702	0.707	0.003	0.746	0.749	0.006	
	M-159	2-4	1	0.094	0.108	0.001	0.098	0.115	0.003	
			2	0.194	0.165	0.003	0.149	0.108	0.005	
			3	0.007	0.008	0.000	0.005	0.005	0.001	
			4	0.002	0.004	0.000	0.001	0.002	0.000	
			0	0.054	0.052	0.003	0.073	0.073	0.004	
	Tyr	f302	1-2	1	0.771	0.771	0.006	0.810	0.810	0.006
				2	0.175	0.176	0.007	0.116	0.116	0.003

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  $^{13}\text{C}$  incorporation and is equal to the number of  $^{13}\text{C}$  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.