

Table S1. Metal contacts in the P1 crystal structures

PDB	Metal	Residue (Atom)	Distance (Å)	Residue (Atom)	Distance (Å)
5DK8 P1	Mg101 (A)	W214A	2.07	Lys29A (NZ)	2.80
				Asp21A (OD2)	2.68
		W204A	2.09	Lys29B*(NZ)	3.13
				Wat149B*	2.79
				Glu18A (OE2)	2.52
				Asn25A (OD1)	2.62
		W209A	2.08	Lys29A (NZ)	2.99
				Glu18B*(OE1)	3.01
				Glu18B*(OE2)	3.25
				Lys29B (NZ)	2.75
				Asn25B* (OD1)	3.36
				Asn25B* (ND2)	3.50
		W206A	2.04	Asp21B*(OD1)	3.05
				Glu18B*(OE2)	2.82
Lys29A (NZ)	3.21				
Lys29B (NZ)	2.75				
W136B*	2.05	Asp21B*(OD1)	3.41		
		Asp21B*(OD2)	2.71		
		Wat158B*	2.71		
		Asn25B* (ND2)	3.00		
W120B*	1.98	Asp21B*(OD1)	3.41		
		Asp21B*(OD2)	2.71		
		Wat158B*	2.71		
		Asn25B* (ND2)	3.00		
		Asp21B*(OD1)	3.41		
		Asp21B*(OD2)	2.71		
		Wat158B*	2.71		
4PIH P1	Ca101 (A)	Wat216A	2.02	Asn25A (OD1)	2.73
		Wat232A	2.24		
		Wat208A	2.18	Asp21B*(OD1)	2.72
				Asn25B*(ND2)	3.00
		Asp21A (OD1)	2.65		
		Asp21A (OD2)	2.58		
		Glu18A (OE1)	2.23		

Table S2. Equivalent metal contacts in the cubic and orthorhombic space group structures

PDB	Metal	Residue (Atom)	Distance (Å)	PDB	Metal	Residue (Atom)	Distance (Å)	
3EEC P4 ₃ 32	Cd103 (A)	Glu18A (OE1)	2.72	4K7S P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	Zn102 (A)	Wat299A	1.93	
		Glu18A (OE2)	2.29			Asp21A (OD1)	2.01	
		Wat110A*	3.41			Asp21A (OD2)	2.87	
		Glu18A*(OE1)	2.72			Glu18B*(OE1)	2.02	
		Asp21A*(OE1)	2.56			Glu18B*(OE2)	2.50	
		Asp21A*(OE2)	2.61			4XOK P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	Zn102 (A)	Glu18B*(OE1)
	Lys29A*(NZ)	3.59	Glu18B*(OE2)	2.41				
	Cd203 (B)	Wat209B	2.59	Wat205A	2.14			
		Wat208B	2.89	Asp21A (OD1)	2.28			
		Lys29B (NZ)	3.14	Asp21A (OD2)	2.68			
		Asp21B (OD1)	2.63	Zn101 (C)	Glu18C (OE1)			2.61
		Asp21B (OD2)	2.53		Glu18C (OE2)	1.95		
		Glu18B (OE1)	2.96		Asp21B*(OD1)	2.07		
		Glu18B*(OE2)	2.36		Asp21B*(OD2)	2.79		
Glu18B*(OE1)		2.75	4K7W P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	Zn102 (A)	Wat257C	2.03		
3NO3 P4 ₃ 32	Zn102 (A)	Wat106A*			3.17	Asp21C (OD1)	2.03	
		Glu18A (OE2)			2.94	Asp21C (OD2)	2.66	
		Asp21A (OD1)			2.26	ACT104C (OXT)	1.94	
		Asp21A (OD2)			2.49	ACT104C (O)	3.16	
		Glu18A*(OE1)			2.12	Glu18A (OE1)	1.91	
		Glu18A*(OE2)			2.84	Glu18A (OE2)	2.86	
	Lys29A (NZ)	3.70			Zn103 (A)	Glu18B*(OE1)	1.96	
	Zn103 (B)	Asp21B (OD1)				2.65	Glu18B*(OE2)	2.83
		Asp21B (OD2)				2.64	Wat215A	1.80
		Glu18B*(OE1)				2.85	EDO106A (O2)	1.87
Glu18B*(OE2)		2.43			Asp21A (OD1)	2.05		
4XOL P4 ₃ 32	Zn302 (A)	Glu18A (OE2)			3.36	Zn104 (A)	Asp21A (OD2)	2.82
		Asp21A (OE1)			2.26		Glu18B*(OE1)	3.33
		Asp21A (OE2)	2.53	Wat271C	2.07			
		Glu18A*(OE1)	2.17	Wat215A	2.05			
		Glu18A*(OE2)	2.53	Wat278C	2.39			
	Zn101 (B)	Asp21B (OD1)	2.39	Zn102 (C)	Wat257C	1.87		
		Asp21B (OD2)	2.81		Glu18C (OE1)	1.90		
		Wat205B	2.35		Glu18C (OE2)	2.76		
		Glu18B*(OE1)	2.52		Asp21B*(OD1)	2.00		
		Glu18B*(OE2)	2.34		Asp21B*(OD2)	2.84		
				Wat271C	1.90			
				Wat281C	2.03			

(*) Labelled residues belong to symmetry-related HUb molecules