

Table S1: A list of 125 non-redundant heme-binding protein chains

Protein ID	Length (AA)	Ligand	Resolution	R-factor	# of heme
1ASHA	150	HEM	2.150	0.18	1
1C2RA	116	HEM	2.500	0.17	1
1CTJA	89	HEM	1.100	0.14	1
1D0CA	444	HEM	1.650	0.21	1
1D2VC	466	HEM	1.750	0.24	1
1DLWA	116	HEM	1.540	0.13	1
1ECAA	136	HEM	1.400	0.18	1
1FS7A	485	HEM	1.600	0.18	5
1FT5A	211	HEM	1.600	0.19	4
1GVHA	396	HEM	2.190	0.19	1
1GWEA	503	HEM	0.880	0.09	1
1GWIA	411	HEM	1.920	0.21	1
1GWUA	309	HEM	1.310	0.17	1
1H97A	147	HEM	1.170	0.12	1
1IW0A	215	HEM	1.400	0.17	1
1IZOA	417	HEM	2.100	0.25	1
1J0PA	108	HEM	0.910	0.11	4
1J77A	209	HEM	1.500	0.23	1
1JBQA	435	HEM	2.600	0.26	1
1JF3A	147	HEM	1.400	0.19	1
1JNIA	123	HEM	1.250	0.16	2
1KQFC	217	HEM	1.600	0.18	2
1M1QA	91	HEM	0.970	0.14	4
1MJ4A	82	HEM	1.200	0.12	1
1N40A	396	HEM	1.060	0.13	1
1N5UA	585	HEM	1.900	0.23	1
1N97A	389	HEM	1.800	0.21	1
1OR4A	178	HEM	2.150	0.20	1
1PBYA	489	HEM	1.700	0.19	2
1PL3A	186	HEM	1.900	0.17	1
1PO5A	476	HEM	1.600	0.22	1
1Q1FA	151	HEM	1.500	0.22	1
1QHUA	460	HEM	2.300	0.20	1
1RWJA	82	HEM	1.700	0.20	3
1TU9A	134	HEM	1.200	0.16	1
1U55A	188	HEM	1.770	0.23	1
1U5UA	374	HEM	2.000	0.21	1
1V9YA	167	HEM	1.320	0.16	1
1X8QA	184	HEM	0.850	0.10	1
1XMEA	568	HEM	2.300	0.22	1
1Y5IC	225	HEM	1.900	0.18	2
1YIQA	689	HEM	2.200	0.17	1

1Z9NA	177	HEM	1.500	0.16	1
256BA	106	HEM	1.400	0.16	1
2BKMA	128	HEM	1.500	0.17	1
2BS2C	256	HEM	1.780	0.23	2
2CIBA	455	HEM	1.500	0.20	1
2CIWA	299	HEM	1.150	0.15	1
2CZSA	80	HEM	1.500	0.22	2
2D0TA	406	HEM	2.300	0.24	1
2D3QA	442	HEM	2.800	0.27	1
2E3BA	344	HEM	1.300	0.15	1
2FMYA	220	HEM	2.200	0.21	1
2FWTA	125	HEM	1.850	0.15	2
2G5GX	268	HEM	1.900	0.21	1
2GDMA	153	HEM	1.700	0.16	1
2H88C	140	HEM	1.740	0.18	1
2H88D	103	HEM	1.740	0.18	1
2HQ2A	354	HEM	1.450	0.17	1
2IIZA	312	HEM	2.300	0.21	1
2IJ2A	470	HEM	1.200	0.15	1
2IMQX	282	HEM	1.300	0.18	1
2ITFA	127	HEM	1.900	0.17	2
2IVFC	214	HEM	1.880	0.15	1
2J8WA	129	HEM	1.290	0.15	1
2LHBA	150	HEM	2.000	0.14	1
2NRLA	147	HEM	0.910	0.15	1
2NW8A	306	HEM	1.600	0.17	1
2NWBA	400	HEM	2.400	0.22	1
2O09A	189	HEM	2.100	0.19	1
2O6PA	161	HEM	1.500	0.20	2
2OYYA	76	HEM	2.500	0.24	1
2PBJA	290	HEM	2.800	0.24	1
2Q7AA	152	HEM	2.100	0.17	2
2Q8PA	260	HEM	1.950	0.20	1
2R7AA	256	HEM	2.050	0.21	1
2V7KA	361	HEM	1.700	0.18	1
2VE3A	444	HEM	2.100	0.23	1
2VEBA	195	HEM	1.300	0.16	1
2VV6A	119	HEM	1.500	0.18	1
2VXHA	251	HEM	2.100	0.22	1
2W31A	162	HEM	1.500	0.17	1
2W3GA	153	HEM	1.400	0.19	1
2WDQC	129	HEM	2.400	0.17	1
2WDQD	115	HEM	2.400	0.17	1
2WIYA	394	HEM	1.490	0.15	1
2WJNC	336	HEM	1.860	0.17	4
2Z6FA	131	HEM	1.900	0.20	1

2Z8AA	146	HEM	1.060	0.14	1
2ZDOA	109	HEM	1.800	0.20	1
2ZS0D	155	HEM	1.600	0.17	1
2ZWUA	415	HEM	1.300	0.17	1
3A16A	373	HEM	1.600	0.25	1
3B47A	134	HEM	2.000	0.25	1
3B98A	475	HEM	2.080	0.23	1
3BXUA	71	HEM	1.350	0.16	3
3BZ1E	84	HEM	2.900	0.25	1
3BZ1F	45	HEM	2.900	0.25	1
3CQVA	199	HEM	1.900	0.20	1
3CSLA	865	HEM	2.700	0.24	1
3CX5C	385	HEM	1.900	0.24	2
3D1KA	142	HEM	1.250	0.17	1
3DANA	473	HEM	1.800	0.18	1
3DR9A	137	HEM	1.260	0.17	1
3E2CA	158	HEM	1.800	0.20	1
3E2OA	294	HEM	1.060	0.17	1
3E4WA	320	HEM	1.800	0.20	1
3ELLA	184	HEM	1.700	0.17	1
3EMMA	166	HEM	1.360	0.17	1
3EQMA	503	HEM	2.900	0.22	1
3H8TA	191	HEM	1.800	0.16	1
3HCNA	359	HEM	1.600	0.21	1
3IVYA	433	HEM	1.350	0.16	1
3PGHA	587	HEM	2.500	0.24	1

1E29A	135	HEC	1.210	0.15	1
1E2WA	251	HEC	1.600	0.20	1
1GU2A	124	HEC	1.190	0.15	1
1H21A	247	HEC	2.500	0.20	4
1H32A	261	HEC	1.500	0.20	3
1M70A	190	HEC	1.250	0.16	2
1YNRA	80	HEC	2.000	0.17	1
2C1VA	338	HEC	1.200	0.17	2
2JE3A	186	HEC	1.800	0.20	1
3CP5A	124	HEC	1.240	0.13	1
3F29A	25	HEC	2.000	0.15	8

--Protein chains with more than one heme molecules are shaded.

Table S2. Heme and heme-like ligands in PDB

ID	Formula	Name	ID	Formula	Name
1CP	C ₃₆ H ₄₄ N ₄ O ₈	coproporphyrin I	HEA	C ₄₉ H ₅₆ FE N ₄ O ₆	heme-a
1FH	C ₄₀ H ₃₈ FE N ₄ O ₄	12-phenylheme	HEB	C ₃₄ H ₃₄ FE N ₄ O ₄	heme b/c
2FH	C ₄₀ H ₃₆ FE N ₄ O ₄	2-phenylheme	HEC	C ₃₄ H ₃₄ FE N ₄ O ₄	heme c
6HE	C ₃₂ H ₃₀ FE N ₄ O ₂	6-methy-6-depropionatehemin	HEG	C ₃₄ H ₃₂ MG N ₄ O ₄	protoporphyrin ix containing mg
7HE	C ₃₂ H ₃₀ FE N ₄ O ₂	7-methyl-7-depropionatehemin	HEM	C ₃₄ H ₃₂ FE N ₄ O ₄	protoporphyrin ix containing fe
BCL	C ₅₅ H ₇₄ MG N ₄	bacteriochlorophyll a	HEO	C ₄₉ H ₅₈ FE N ₄ O ₅	heme o
BLA	C ₃₃ H ₃₄ N ₄ O ₆	biliverdin ix alpha	HES	C ₃₄ H ₃₄ N ₄ O ₄ ZN	zinc substituted heme c
CCH	C ₃₃ H ₃₀ FE N ₄ O ₅	clorocruoro hem	HEV	C ₃₆ H ₃₂ FE N ₄ O ₄	1,3-dedimethyl-1,3-divinyl heme
CL2	C ₅₅ H ₇₂ MG N ₄ O ₅	beta chlorophyll a	HFM	C ₃₃ H ₃₂ FE N ₄ O ₅	2-formyl-protoporphryn ix
CLN	C ₃₄ H ₃₂ FE N ₄ O ₄ S	sulfur substituted protoporphyrin ix	HKL	C ₃₄ H ₃₄ Fe N ₄ O ₃	Fe(III) pyropheophorbide-a methyl ester
COH	C ₃₄ H ₃₂ CO N ₄ O ₄	protoporphyrin ix containing co	HIF	C ₃₄ H ₃₆ FE N ₄ O ₅	fe(iii)-(4-mesoporphyrinone)
CP3	C ₃₆ H ₄₄ N ₄ O ₈	coproporphyrin iii	HME	C ₃₄ H ₃₆ FE N ₄ O ₄	porphycene containing fe
CPO	C ₃₅ H ₅₃ FE N ₆ O ₁₃	coprogen	HNI	C ₃₄ H ₃₂ N ₄ NI O ₄	protoporphyrin ix containing ni(ii)
DDH	C ₃₄ H ₃₂ FE N ₄ O ₆	diacetyldeuteroheme	MMP	C ₃₅ H ₄₀ N ₄ O ₄	n-methylmesoporphyrin
DEU	C ₃₀ H ₂₈ CO N ₄ O ₄	co(iii)-(deuteroporphyrin ix)	MNH	C ₃₄ H ₃₂ MN N ₄ O ₄	manganese protoporphyrin ix
DHE	C ₃₄ H ₃₂ FE N ₄ O ₁₀	heme d	MNR	C ₃₄ H ₃₂ MN N ₄ O ₄	protoporphyrin ix containing mn
FCI	C ₂₈ H ₄₄ FE N ₉ O ₁₃	ferricrocin-iron	MP1	C ₃₅ H ₃₉ CU N ₄ O ₄	n-methylmesoporphyrin w/ copper
FDD	C ₃₂ H ₃₂ FE N ₄ O ₄	fe(iii) 2,4-dimethyl deuteroporphyrin ix	PC3	C ₃₆ H ₃₆ CO N ₄ O ₈	coproporphyrin i containing co(iii)
FDE	C ₃₀ H ₂₈ FE N ₄ O ₄	fe(iii) deuteroporphyrin ix	PCU	C ₄₄ H ₃₆ N ₈ CU	cu(ii)meso(4-n-tetramethylpyridyl) porphyrin
FEC	C ₃₆ H ₃₆ FE N ₄ O ₈	fe-coproporphyrin iii	PFC	C ₃₄ H ₄₈ FE N ₉ O ₁₂	phenylferricrocin-iron
FMI	C ₃₄ H ₃₆ FE N ₄ O ₅	fe-(4-mesoporphyrinone)-r-isomer	PHO	C ₅₅ H ₇₄ N ₄ O ₅	pheophytin a
H02	C ₃₅ H ₄₂ N ₄ O ₄	N-methyl protoporphyrin ix 2,4-disulfonic acid	PNI	C ₄₄ H ₃₆ N ₈ NI	tetra(n-methyl-pyridyl) porphyrin-nickel
HAS	C ₅₄ H ₆₄ FE N ₄ O ₆	heme-as	POR	C ₂₀ H ₁₂ FE N ₄	porphyrin fe(iii)
HCO	C ₃₄ H ₃₄ FE N ₄ O ₅	2-acetyl-protoporphyrin ix	PP9	C ₃₄ H ₃₄ N ₄ O ₄	protoporphyrin ix
HDD	C ₃₄ H ₃₂ FE N ₄ O ₅	cis-heme d hydroxychlorin gamma-spirolactone	SRM	C ₄₂ H ₄₂ FE N ₄ O ₁₆	siroheme
HDM	C ₃₆ H ₃₆ FE N ₄ O ₄	dimethyl propionate ester heme	UP3	C ₄₀ H ₃₈ N ₄ O ₁₆	porphyrin-2,7,12,18-tetrayl]tetrapropanoic acid
HE5	C ₃₂ H ₃₄ N ₄ O ₄ ZN	zinc(ii)-deuteroporphyrin dimethylester	VER	C ₃₀ H ₂₇ FE N ₄ O ₃	iron-octaethylporphyrin
HE6	C ₂₈ H ₂₄ FE N ₄ O ₄	6,7-dicarboxyl-1,2,3,4,5,8-hexamethylhemin	ZEM	C ₃₄ H ₃₂ N ₄ O ₅ ZN	zn(ii)-(20-oxo-protoporphyrin ix)
			ZNH	C ₃₄ H ₃₂ N ₄ O ₄ ZN	protoporphyrin ix containing zn

Table S3. Heme proteins with multiple apo structures

Holo protein	Apo proteins
1KBIB	1FCBB, 1KBIB, 1LCOB, 1LDCB, 1LTDB, 1SZEB, 1SZFB, 1SZGB, and 2OZ0B
1N45A	1NI6B, 1S8CB, and 1S8CD
1N5UA	1AO6A, 1BJ5A, 1BM0B, 1E78A, 1E7AA, 1E7BA, 1E7CA, 1E7FA, 1EFHA, 1GNIA, 1H9ZA, 1HK1A, 1HK3A, 1HK5A, 1TF0A, 1UORA, 2BX8B, 2BXAB, 2BXEB, 2BXFB, 2BXGB, 2BXHB, 2BXKA, 2BXMA, 2BXOA, 2I30A, 3B9LA, and 3CX9A