

Table S1: Changes in the charge profile of all Bax residues upon Bax activation.

Residue	ΔQ_{res} [e]	$RMSD_{\text{res}}$ [e]	Residue	ΔQ_{res} [e]	$RMSD_{\text{res}}$ [e]	Residue	ΔQ_{res} [e]	$RMSD_{\text{res}}$ [e]
1	-0.1727	0.0197	65	0.2925	0.0268	129	-0.0789	0.0265
2	-0.2581	0.0346	66	0.0650	0.0267	130	-0.0329	0.0092
3	0.0362	0.0299	67	-0.0221	0.0207	131	-0.1535	0.0213
4	-0.1329	0.0471	68	-0.0845	0.0241	132	-0.0990	0.0195
5	0.1505	0.0473	69	0.1032	0.0322	133	-0.1109	0.0256
6	-0.0575	0.0233	70	0.0157	0.0276	134	0.3244	0.0381
7	0.3395	0.0292	71	-0.1625	0.0392	135	-0.0550	0.0148
8	0.0183	0.0252	72	-0.2149	0.0342	136	-0.0387	0.0149
9	-0.0806	0.0202	73	0.1549	0.0356	137	0.0572	0.0269
10	0.0749	0.0326	74	0.1090	0.0274	138	-0.2163	0.0406
11	-0.0580	0.0246	75	-0.0763	0.0341	139	-0.0770	0.0131
12	-0.0543	0.0261	76	-0.0212	0.0165	140	0.0605	0.0267
13	0.0429	0.0297	77	0.0882	0.0363	141	-0.1517	0.0251
14	-0.2795	0.0387	78	-0.1416	0.0198	142	-0.3367	0.0535
15	-0.0438	0.0341	79	0.0604	0.0217	143	0.0186	0.0133
16	0.1542	0.0440	80	0.1033	0.0273	144	-0.0900	0.0173
17	-0.3526	0.0406	81	-0.1483	0.0246	145	0.0221	0.0398
18	-0.1413	0.0249	82	-0.9790	0.0243	146	-0.2237	0.0270
19	0.1719	0.0214	83	0.0138	0.0282	147	0.1143	0.0314
20	0.0130	0.0180	84	-0.3090	0.0427	148	-0.0160	0.0172
21	0.0406	0.0406	85	-0.0824	0.0498	149	0.0015	0.0271
22	-0.0559	0.0172	86	-0.0585	0.0362	150	-0.0401	0.0419
23	-0.1198	0.0241	87	0.0218	0.0532	151	-0.1758	0.0307
24	0.0097	0.0160	88	-0.0281	0.0126	152	-0.0757	0.0271
25	-0.1363	0.0213	89	0.2063	0.0310	153	-0.0706	0.0350
26	0.0005	0.0112	90	-0.1491	0.0297	154	0.0215	0.0230
27	-0.0028	0.0198	91	0.0201	0.0149	155	0.1332	0.0161
28	0.0162	0.0234	92	-0.0622	0.0148	156	-0.0122	0.0235
29	-0.1682	0.0291	93	0.0009	0.0166	157	-0.0645	0.0239
30	0.0664	0.0141	94	0.2583	0.0340	158	-0.0152	0.0128
31	0.0481	0.0089	95	0.0280	0.0296	159	0.1476	0.0303
32	-0.0194	0.0407	96	0.0181	0.0154	160	-0.0065	0.0223
33	-0.1330	0.0359	97	-0.0047	0.0171	161	0.0606	0.0130
34	-0.1380	0.0351	98	-0.2369	0.0458	162	0.2290	0.0255
35	-0.0988	0.0221	99	-0.1696	0.0262	163	0.0564	0.0194
36	-0.0804	0.0285	100	-0.0130	0.0218	164	-0.0555	0.0214
37	0.3251	0.0310	101	-0.2590	0.0408	165	0.3539	0.0289
38	0.1516	0.0258	102	-0.2960	0.0424	166	0.1540	0.0518
39	0.1640	0.0394	103	0.0283	0.0381	167	-0.3723	0.0508
40	0.1234	0.0409	104	0.0962	0.0303	168	0.0442	0.0216
41	0.0227	0.0257	105	0.0431	0.0160	169	0.0308	0.0434
42	-0.3192	0.05	106	0.0669	0.0314	170	-0.0262	0.0273
43	0.0534	0.0228	107	-0.2199	0.0328	171	-0.0509	0.0123
44	0.3388	0.0322	108	0.1159	0.0517	172	-0.1682	0.0314
45	-0.0372	0.0322	109	0.2676	0.0354	173	0.1683	0.0231
46	-0.2372	0.0589	110	0.0538	0.0275	174	0.1826	0.0359
47	0.3098	0.0319	111	-0.0034	0.0239	175	-0.1683	0.0134
48	-0.3366	0.0580	112	-0.1253	0.0235	176	-0.0898	0.0191
49	0.2935	0.0327	113	-0.0981	0.0225	177	0.0877	0.0293
50	0.0295	0.04	114	0.1738	0.0182	178	0.0036	0.0167
51	-0.0329	0.0132	115	0.0333	0.0150	179	-0.0522	0.0175
52	0.0810	0.04	116	-0.1464	0.0131	180	-0.0921	0.0141
53	-0.0396	0.0454	117	0.0532	0.0165	181	-0.0433	0.0310
54	0.0887	0.0204	118	-0.0467	0.0269	182	-0.0004	0.0182
55	0.0890	0.0271	119	0.2563	0.0326	183	-0.0600	0.0184
56	0.0836	0.0255	120	0.0884	0.0186	184	-0.0403	0.0182
57	0.0399	0.0248	121	-0.0412	0.0119	185	0.1295	0.0210
58	-0.0536	0.0164	122	-0.0197	0.0154	186	0.1059	0.0190
59	0.0526	0.0141	123	0.0267	0.0157	187	-0.0701	0.0242
60	-0.0712	0.0321	124	-0.1912	0.0256	188	-0.3319	0.0340
61	0.0300	0.0186	125	-0.1811	0.0247	189	0.3947	0.0493
62	-0.0291	0.0187	126	0.1548	0.0251	190	0.5118	0.0487
63	0.0454	0.0159	127	0.1162	0.0216	191	-0.1540	0.0341
64	0.3360	0.0315	128	-0.0400	0.0154	192	0.0606	0.06