

SUPPLEMENTARY INFORMATION

Table S1: Total Energy Decomposition of MO-Hex complex

Residue	Location	Internal	van der Waals	Electrostatic	Polar Solvation	Non-Polar Solv.	TOTAL
PRO 1	R PRO 1	0.000 +/- 0.000	-0.330 +/- 0.574	-0.056 +/- 0.643	0.673 +/- 0.989	-0.048 +/- 0.106	0.240 +/- 0.268
PRO 2	R PRO 2	0.000 +/- 0.000	-0.326 +/- 0.491	0.114 +/- 0.132	-0.087 +/- 0.128	-0.030 +/- 0.071	-0.329 +/- 0.548
THR 3	R THR 3	0.000 +/- 0.000	-0.887 +/- 0.664	0.114 +/- 0.271	0.537 +/- 0.442	-0.130 +/- 0.089	-0.365 +/- 0.483
LEU 4	R LEU 4	0.000 +/- 0.000	-1.948 +/- 0.743	0.025 +/- 0.304	0.241 +/- 0.373	-0.265 +/- 0.101	-1.948 +/- 0.755
GLN 5	R GLN 5	0.000 +/- 0.000	-1.726 +/- 0.608	-0.212 +/- 0.389	1.042 +/- 0.519	-0.245 +/- 0.079	-1.141 +/- 0.564
ARG 6	R ARG 6	0.000 +/- 0.000	-0.586 +/- 0.868	-0.336 +/- 0.768	1.008 +/- 1.381	-0.073 +/- 0.142	0.013 +/- 0.383
CYX 7	R CYX 7	0.000 +/- 0.000	-0.190 +/- 0.048	-0.072 +/- 0.120	0.138 +/- 0.125	-0.000 +/- 0.002	-0.125 +/- 0.067
CYX 8	R CYX 8	0.000 +/- 0.000	-1.700 +/- 0.613	-0.318 +/- 0.313	0.813 +/- 0.423	-0.147 +/- 0.058	-1.352 +/- 0.543
ARG 9	R ARG 9	0.000 +/- 0.000	-1.277 +/- 0.778	0.043 +/- 1.102	0.614 +/- 1.196	-0.140 +/- 0.095	-0.760 +/- 0.597
GLN 10	R GLN 10	0.000 +/- 0.000	-0.120 +/- 0.086	0.011 +/- 0.082	0.180 +/- 0.144	-0.002 +/- 0.009	0.068 +/- 0.065
LEU 11	R LEU 11	0.000 +/- 0.000	-0.125 +/- 0.034	0.011 +/- 0.046	0.054 +/- 0.048	0.000 +/- 0.000	-0.059 +/- 0.036
ARG 12	R ARG 12	0.000 +/- 0.000	-0.965 +/- 0.553	1.076 +/- 0.742	-0.209 +/- 0.637	-0.161 +/- 0.083	-0.260 +/- 0.430
ASN 13	R ASN 13	0.000 +/- 0.000	-0.047 +/- 0.041	-0.080 +/- 0.070	0.262 +/- 0.122	-0.001 +/- 0.007	0.135 +/- 0.050
VAL 14	R VAL 14	0.000 +/- 0.000	-0.058 +/- 0.034	-0.044 +/- 0.055	0.099 +/- 0.066	-0.000 +/- 0.000	-0.004 +/- 0.035
SER 15	R SER 15	0.000 +/- 0.000	-0.076 +/- 0.118	0.074 +/- 0.114	-0.046 +/- 0.132	-0.001 +/- 0.015	-0.049 +/- 0.099
PRO 16	R PRO 16	0.000 +/- 0.000	-0.731 +/- 0.762	0.193 +/- 0.400	0.233 +/- 0.359	-0.085 +/- 0.106	-0.390 +/- 0.647
PHE 17	R PHE 17	0.000 +/- 0.000	-1.936 +/- 1.822	0.052 +/- 0.255	0.890 +/- 0.746	-0.315 +/- 0.295	-1.309 +/- 1.400
CYX 18	R CYX 18	0.000 +/- 0.000	-0.237 +/- 0.134	-0.021 +/- 0.064	0.108 +/- 0.070	-0.000 +/- 0.002	-0.150 +/- 0.125
ARG 19	R ARG 19	0.000 +/- 0.000	-0.324 +/- 0.108	-0.029 +/- 0.533	0.619 +/- 0.569	-0.003 +/- 0.012	0.264 +/- 0.138
CYX 20	R CYX 20	0.000 +/- 0.000	-2.188 +/- 0.990	-0.195 +/- 0.426	0.850 +/- 0.499	-0.262 +/- 0.147	-1.795 +/- 0.888
PRO 21	R PRO 21	0.000 +/- 0.000	-1.797 +/- 1.028	0.044 +/- 0.185	0.350 +/- 0.348	-0.218 +/- 0.124	-1.621 +/- 1.059
SER 22	R SER 22	0.000 +/- 0.000	-0.413 +/- 0.300	-0.019 +/- 0.093	0.299 +/- 0.132	-0.005 +/- 0.006	-0.138 +/- 0.261
LEU 23	R LEU 23	0.000 +/- 0.000	-0.704 +/- 0.552	-0.032 +/- 0.098	0.167 +/- 0.122	-0.038 +/- 0.037	-0.606 +/- 0.526
ARG 24	R ARG 24	0.000 +/- 0.000	-2.592 +/- 1.598	-0.401 +/- 1.202	1.968 +/- 1.578	-0.365 +/- 0.228	-1.389 +/- 1.227
GLN 25	R GLN 25	0.000 +/- 0.000	-2.305 +/- 1.041	-0.003 +/- 0.294	1.259 +/- 0.685	-0.267 +/- 0.156	-1.316 +/- 0.818
ALA 26	R ALA 26	0.000 +/- 0.000	-0.126 +/- 0.038	-0.014 +/- 0.067	0.005 +/- 0.075	0.000 +/- 0.000	-0.135 +/- 0.054
VAL 27	R VAL 27	0.000 +/- 0.000	-0.225 +/- 0.134	-0.037 +/- 0.056	-0.023 +/- 0.087	-0.000 +/- 0.001	-0.286 +/- 0.194
GLN 28	R GLN 28	0.000 +/- 0.000	-0.619 +/- 0.516	-0.004 +/- 0.180	0.655 +/- 0.381	-0.070 +/- 0.086	-0.039 +/- 0.399
SER 29	R SER 29	0.000 +/- 0.000	-0.441 +/- 0.374	-0.042 +/- 0.092	0.464 +/- 0.246	-0.041 +/- 0.051	-0.060 +/- 0.271
ALA 30	R ALA 30	0.000 +/- 0.000	-0.239 +/- 0.330	-0.052 +/- 0.151	0.147 +/- 0.184	-0.009 +/- 0.020	-0.153 +/- 0.286
GLN 31	R GLN 31	0.000 +/- 0.000	-0.188 +/- 0.346	-0.002 +/- 0.105	0.288 +/- 0.275	-0.015 +/- 0.049	0.084 +/- 0.220
GLN 32	R GLN 32	0.000 +/- 0.000	-0.449 +/- 0.797	-0.036 +/- 0.143	0.556 +/- 0.577	-0.076 +/- 0.136	-0.006 +/- 0.543
GLN 33	R GLN 33	0.000 +/- 0.000	-1.136 +/- 1.078	-0.079 +/- 0.293	0.971 +/- 0.778	-0.197 +/- 0.187	-0.441 +/- 0.764
GLN 34	R GLN 34	0.000 +/- 0.000	-0.440 +/- 0.587	-0.090 +/- 0.208	0.486 +/- 0.537	-0.053 +/- 0.084	-0.097 +/- 0.389
GLY 35	R GLY 35	0.000 +/- 0.000	-0.048 +/- 0.152	0.001 +/- 0.071	0.060 +/- 0.131	-0.005 +/- 0.032	0.008 +/- 0.073
GLN 36	R GLN 36	0.000 +/- 0.000	-0.046 +/- 0.221	-0.002 +/- 0.049	0.081 +/- 0.153	-0.006 +/- 0.040	0.027 +/- 0.137
VAL 37	R VAL 37	0.000 +/- 0.000	-0.040 +/- 0.055	-0.019 +/- 0.052	0.089 +/- 0.097	-0.001 +/- 0.007	0.030 +/- 0.049
GLY 38	R GLY 38	0.000 +/- 0.000	-0.037 +/- 0.054	0.031 +/- 0.041	-0.014 +/- 0.055	-0.000 +/- 0.001	-0.020 +/- 0.031
PRO 39	R PRO 39	0.000 +/- 0.000	-0.575 +/- 0.858	0.087 +/- 0.205	0.209 +/- 0.331	-0.095 +/- 0.141	-0.374 +/- 0.644

GLN 40	R GLN 40	0.000 +/- 0.000	-0.540 +/- 0.801	0.026 +/- 0.155	0.317 +/- 0.501	-0.077 +/- 0.119	-0.274 +/- 0.570
GLN 41	R GLN 41	0.000 +/- 0.000	-0.114 +/- 0.108	0.030 +/- 0.076	0.064 +/- 0.108	-0.000 +/- 0.006	-0.020 +/- 0.086
VAL 42	R VAL 42	0.000 +/- 0.000	-0.442 +/- 0.518	0.102 +/- 0.117	-0.080 +/- 0.123	-0.031 +/- 0.047	-0.450 +/- 0.567
GLY 43	R GLY 43	0.000 +/- 0.000	-0.837 +/- 0.948	0.008 +/- 0.232	0.268 +/- 0.409	-0.104 +/- 0.116	-0.665 +/- 0.810
HIE 44	R HIE 44	0.000 +/- 0.000	-1.042 +/- 0.672	0.124 +/- 0.189	0.577 +/- 0.439	-0.145 +/- 0.075	-0.486 +/- 0.467
MET 45	R MET 45	0.000 +/- 0.000	-0.219 +/- 0.141	0.037 +/- 0.064	-0.114 +/- 0.095	-0.000 +/- 0.000	-0.296 +/- 0.216
TYR 46	R TYR 46	0.000 +/- 0.000	-2.921 +/- 2.519	0.026 +/- 0.251	0.817 +/- 0.848	-0.290 +/- 0.256	-2.369 +/- 2.049
ARG 47	R ARG 47	0.000 +/- 0.000	-2.252 +/- 1.478	-0.331 +/- 0.742	1.474 +/- 1.165	-0.269 +/- 0.187	-1.378 +/- 1.137
VAL 48	R VAL 48	0.000 +/- 0.000	-1.642 +/- 0.471	-0.206 +/- 0.185	0.135 +/- 0.169	-0.120 +/- 0.034	-1.833 +/- 0.530
ALA 49	R ALA 49	0.000 +/- 0.000	-0.530 +/- 0.404	-0.035 +/- 0.077	0.252 +/- 0.193	-0.014 +/- 0.015	-0.328 +/- 0.319
SER 50	R SER 50	0.000 +/- 0.000	-0.902 +/- 0.739	-0.056 +/- 0.168	0.508 +/- 0.353	-0.070 +/- 0.068	-0.520 +/- 0.584
ARG 51	R ARG 51	0.000 +/- 0.000	-2.999 +/- 0.793	-1.117 +/- 0.590	2.900 +/- 0.923	-0.389 +/- 0.082	-1.606 +/- 0.720
ILE 52	R ILE 52	0.000 +/- 0.000	-0.737 +/- 0.323	-0.028 +/- 0.081	0.106 +/- 0.116	-0.026 +/- 0.019	-0.686 +/- 0.336
PRO 53	R PRO 53	0.000 +/- 0.000	-0.247 +/- 0.111	-0.050 +/- 0.077	0.108 +/- 0.094	-0.004 +/- 0.009	-0.193 +/- 0.095
ALA 54	R ALA 54	0.000 +/- 0.000	-0.118 +/- 0.045	-0.011 +/- 0.055	0.101 +/- 0.067	-0.001 +/- 0.008	-0.029 +/- 0.055
ILE 55	R ILE 55	0.000 +/- 0.000	-2.012 +/- 0.600	0.232 +/- 0.233	0.415 +/- 0.356	-0.352 +/- 0.088	-1.717 +/- 0.591
CYX 56	R CYX 56	0.000 +/- 0.000	-1.666 +/- 0.654	-0.188 +/- 0.267	0.773 +/- 0.427	-0.188 +/- 0.084	-1.268 +/- 0.608
ASN 57	R ASN 57	0.000 +/- 0.000	-0.275 +/- 0.174	-0.061 +/- 0.225	0.462 +/- 0.275	-0.025 +/- 0.039	0.101 +/- 0.116
LEU 58	R LEU 58	0.000 +/- 0.000	-0.356 +/- 0.227	0.085 +/- 0.071	0.111 +/- 0.067	-0.014 +/- 0.019	-0.174 +/- 0.207
GLN 59	R GLN 59	0.000 +/- 0.000	-0.771 +/- 1.013	0.042 +/- 0.240	0.524 +/- 0.629	-0.119 +/- 0.167	-0.324 +/- 0.669
PRO 60	R PRO 60	0.000 +/- 0.000	-1.782 +/- 1.064	0.033 +/- 0.253	0.253 +/- 0.227	-0.232 +/- 0.131	-1.728 +/- 1.216
MET 61	R MET 61	0.000 +/- 0.000	-0.433 +/- 0.537	0.025 +/- 0.191	0.234 +/- 0.290	-0.025 +/- 0.063	-0.199 +/- 0.459
ARG 62	R ARG 62	0.000 +/- 0.000	-2.993 +/- 1.483	-0.615 +/- 1.141	3.078 +/- 1.836	-0.448 +/- 0.208	-0.977 +/- 1.009
CYX 63	R CYX 63	0.000 +/- 0.000	-1.500 +/- 0.622	-0.224 +/- 0.335	0.526 +/- 0.387	-0.099 +/- 0.087	-1.298 +/- 0.823
PRO 64	R PRO 64	0.000 +/- 0.000	-2.647 +/- 0.909	-0.095 +/- 0.265	0.576 +/- 0.399	-0.482 +/- 0.144	-2.648 +/- 0.928
PHE 65	R PHE 65	0.000 +/- 0.000	-1.010 +/- 1.114	0.528 +/- 0.633	0.481 +/- 1.077	-0.114 +/- 0.216	-0.115 +/- 0.885
GLN 66	R GLN 66	0.000 +/- 0.000	-0.362 +/- 0.288	0.125 +/- 0.484	0.806 +/- 1.027	-0.047 +/- 0.056	0.522 +/- 0.529
ARG 67	R ARG 67	0.000 +/- 0.000	-0.130 +/- 0.112	0.135 +/- 0.379	0.101 +/- 0.441	-0.006 +/- 0.028	0.100 +/- 0.098
CYX 68	R CYX 68	0.000 +/- 0.000	-0.710 +/- 0.461	0.162 +/- 0.153	0.276 +/- 0.276	-0.057 +/- 0.044	-0.329 +/- 0.307
ARG 69	R ARG 69	0.000 +/- 0.000	-3.829 +/- 1.203	-0.844 +/- 0.897	2.704 +/- 1.232	-0.512 +/- 0.148	-2.482 +/- 1.060
HIE 70	R HIE 70	0.000 +/- 0.000	-0.710 +/- 1.052	0.116 +/- 0.258	0.221 +/- 0.579	-0.082 +/- 0.151	-0.455 +/- 0.688
GLN 71	R GLN 71	0.000 +/- 0.000	-0.125 +/- 0.060	0.024 +/- 0.060	0.011 +/- 0.075	-0.000 +/- 0.001	-0.091 +/- 0.069
PHE 72	R PHE 72	0.000 +/- 0.000	-1.426 +/- 0.541	-0.136 +/- 0.168	0.062 +/- 0.179	-0.099 +/- 0.039	-1.599 +/- 0.520
GLN 73	R GLN 73	0.000 +/- 0.000	-2.291 +/- 1.662	0.166 +/- 0.607	1.058 +/- 0.831	-0.288 +/- 0.199	-1.355 +/- 1.196
THR 74	R THR 74	0.000 +/- 0.000	-0.561 +/- 0.790	-0.070 +/- 0.157	0.531 +/- 0.560	-0.071 +/- 0.116	-0.171 +/- 0.441
GLN 75	R GLN 75	0.000 +/- 0.000	-0.160 +/- 0.155	0.009 +/- 0.089	0.192 +/- 0.170	-0.001 +/- 0.010	0.039 +/- 0.077
GLN 76	R GLN 76	0.000 +/- 0.000	-1.386 +/- 1.671	-0.017 +/- 0.458	0.939 +/- 1.068	-0.193 +/- 0.232	-0.656 +/- 1.022
ARG 77	R ARG 77	0.000 +/- 0.000	-2.644 +/- 1.822	-0.931 +/- 1.127	2.797 +/- 2.081	-0.359 +/- 0.221	-1.137 +/- 1.115
LEU 78	R LEU 78	0.000 +/- 0.000	-0.150 +/- 0.059	0.021 +/- 0.063	-0.037 +/- 0.102	-0.000 +/- 0.000	-0.165 +/- 0.061
ARG 79	R ARG 79	0.000 +/- 0.000	-1.560 +/- 1.572	-0.611 +/- 1.051	1.827 +/- 1.962	-0.244 +/- 0.266	-0.589 +/- 0.842
ALA 80	R ALA 80	0.000 +/- 0.000	-0.312 +/- 0.377	0.008 +/- 0.097	0.024 +/- 0.102	-0.018 +/- 0.037	-0.298 +/- 0.423
CYX 81	R CYX 81	0.000 +/- 0.000	-0.113 +/- 0.040	0.000 +/- 0.056	0.042 +/- 0.092	0.000 +/- 0.000	-0.071 +/- 0.074
GLN 82	R GLN 82	0.000 +/- 0.000	-0.625 +/- 0.601	-0.039 +/- 0.228	0.594 +/- 0.517	-0.040 +/- 0.060	-0.109 +/- 0.279

ARG 83	R ARG 83	0.000 +/- 0.000	-2.784 +/- 1.966	-1.041 +/- 1.001	2.752 +/- 1.711	-0.361 +/- 0.248	-1.434 +/- 1.351
VAL 84	R VAL 84	0.000 +/- 0.000	-0.899 +/- 0.585	0.102 +/- 0.135	0.043 +/- 0.178	-0.041 +/- 0.055	-0.796 +/- 0.574
ILE 85	R ILE 85	0.000 +/- 0.000	-0.249 +/- 0.137	-0.037 +/- 0.074	0.056 +/- 0.106	-0.000 +/- 0.001	-0.230 +/- 0.162
GLN 86	R GLN 86	0.000 +/- 0.000	-1.549 +/- 1.410	-0.183 +/- 0.439	0.905 +/- 0.822	-0.166 +/- 0.157	-0.993 +/- 1.094
ARG 87	R ARG 87	0.000 +/- 0.000	-1.991 +/- 1.811	-0.512 +/- 0.499	1.216 +/- 0.914	-0.225 +/- 0.212	-1.512 +/- 1.528
TRP 88	R TRP 88	0.000 +/- 0.000	-3.814 +/- 0.894	-0.273 +/- 0.294	2.005 +/- 0.566	-0.458 +/- 0.090	-2.540 +/- 0.723
SER 89	R SER 89	0.000 +/- 0.000	-0.265 +/- 0.206	-0.064 +/- 0.104	0.268 +/- 0.185	-0.007 +/- 0.020	-0.068 +/- 0.169
GLN 90	R GLN 90	0.000 +/- 0.000	-0.534 +/- 0.554	0.279 +/- 0.445	0.496 +/- 0.627	-0.080 +/- 0.094	0.160 +/- 0.294
LIG 91	L LIG 1	0.000 +/- 0.000	-6.277 +/- 2.687	-0.583 +/- 0.984	0.830 +/- 1.004	-0.917 +/- 0.403	-6.947 +/- 3.062
LIG 92	L LIG 2	0.000 +/- 0.000	-7.377 +/- 4.340	-1.001 +/- 1.767	1.042 +/- 1.715	-1.185 +/- 0.692	-8.521 +/- 5.063
LIG 93	L LIG 3	0.000 +/- 0.000	-4.237 +/- 2.811	-0.445 +/- 1.000	0.666 +/- 0.992	-0.542 +/- 0.370	-4.559 +/- 3.166
LIG 94	L LIG 4	0.000 +/- 0.000	-13.826 +/- 2.664	-0.508 +/- 1.317	0.868 +/- 1.233	-2.270 +/- 0.387	-15.735 +/- 2.982
LIG 95	L LIG 5	0.000 +/- 0.000	-6.124 +/- 2.899	-0.453 +/- 1.029	0.755 +/- 0.950	-0.912 +/- 0.414	-6.734 +/- 3.286
LIG 96	L LIG 6	0.000 +/- 0.000	-7.220 +/- 2.500	-0.995 +/- 1.361	1.200 +/- 1.267	-1.070 +/- 0.422	-8.085 +/- 2.888
LIG 97	L LIG 7	0.000 +/- 0.000	-11.254 +/- 1.946	-0.009 +/- 1.809	0.221 +/- 1.730	-1.977 +/- 0.306	-13.018 +/- 2.281
LIG 98	L LIG 8	0.000 +/- 0.000	-13.554 +/- 2.022	0.070 +/- 1.114	0.420 +/- 1.066	-2.288 +/- 0.288	-15.352 +/- 2.328
LIG 99	L LIG 9	0.000 +/- 0.000	-8.110 +/- 4.087	-0.557 +/- 1.428	0.630 +/- 1.375	-1.249 +/- 0.616	-9.287 +/- 4.697
LIG 100	L LIG 10	0.000 +/- 0.000	-10.383 +/- 3.775	-1.171 +/- 1.143	1.362 +/- 1.143	-1.428 +/- 0.488	-11.620 +/- 4.197

Table S2: Total Energy Decomposition of MO-Ind complex

Residue	Location	Internal	van der Waals	Electrostatic	Polar Solvation	Non-Polar Solv.	TOTAL
PRO 1	R PRO 1	0.000 +/- 0.000	-0.055 +/- 0.137	-2.513 +/- 3.031	2.644 +/- 3.091	-0.011 +/- 0.047	0.065 +/- 0.171
PRO 2	R PRO 2	0.000 +/- 0.000	-0.022 +/- 0.046	0.326 +/- 0.256	-0.335 +/- 0.271	-0.000 +/- 0.006	-0.031 +/- 0.063
THR 3	R THR 3	0.000 +/- 0.000	-0.019 +/- 0.016	0.213 +/- 0.255	-0.173 +/- 0.263	-0.000 +/- 0.001	0.021 +/- 0.026
LEU 4	R LEU 4	0.000 +/- 0.000	-0.092 +/- 0.219	0.045 +/- 0.276	-0.033 +/- 0.296	-0.017 +/- 0.047	-0.096 +/- 0.238
GLN 5	R GLN 5	0.000 +/- 0.000	-0.128 +/- 0.302	-0.412 +/- 1.704	0.452 +/- 1.416	-0.025 +/- 0.069	-0.113 +/- 0.561
ARG 6	R ARG 6	0.000 +/- 0.000	-0.563 +/- 0.733	-13.749 +/- 11.616	12.734 +/- 10.353	-0.151 +/- 0.149	-1.729 +/- 2.025
CYX 7	R CYX 7	0.000 +/- 0.000	-0.037 +/- 0.022	-0.095 +/- 0.203	0.179 +/- 0.228	0.000 +/- 0.000	0.047 +/- 0.041
CYX 8	R CYX 8	0.000 +/- 0.000	-0.067 +/- 0.116	-0.247 +/- 0.379	0.338 +/- 0.435	-0.003 +/- 0.019	0.021 +/- 0.105
ARG 9	R ARG 9	0.000 +/- 0.000	-0.672 +/- 0.798	-7.655 +/- 9.364	7.848 +/- 8.458	-0.155 +/- 0.153	-0.634 +/- 1.266
GLN 10	R GLN 10	0.000 +/- 0.000	-0.376 +/- 0.442	-3.094 +/- 2.893	2.508 +/- 1.931	-0.027 +/- 0.041	-0.989 +/- 1.259
LEU 11	R LEU 11	0.000 +/- 0.000	-0.059 +/- 0.037	-0.062 +/- 0.242	0.071 +/- 0.304	0.000 +/- 0.000	-0.050 +/- 0.115
ARG 12	R ARG 12	0.000 +/- 0.000	-0.585 +/- 0.821	-1.998 +/- 4.769	2.549 +/- 4.698	-0.113 +/- 0.171	-0.147 +/- 0.944
ASN 13	R ASN 13	0.000 +/- 0.000	-0.558 +/- 0.977	-0.209 +/- 1.613	1.051 +/- 1.806	-0.067 +/- 0.133	0.218 +/- 0.742
VAL 14	R VAL 14	0.000 +/- 0.000	-0.130 +/- 0.210	0.337 +/- 0.409	-0.280 +/- 0.467	-0.000 +/- 0.002	-0.073 +/- 0.270
SER 15	R SER 15	0.000 +/- 0.000	-0.158 +/- 0.304	-0.147 +/- 0.697	0.227 +/- 0.557	-0.022 +/- 0.054	-0.100 +/- 0.329
PRO 16	R PRO 16	0.000 +/- 0.000	-0.269 +/- 0.385	-0.192 +/- 0.449	0.274 +/- 0.476	-0.037 +/- 0.060	-0.224 +/- 0.383
PHE 17	R PHE 17	0.000 +/- 0.000	-0.469 +/- 1.038	-0.373 +/- 0.953	0.481 +/- 0.894	-0.082 +/- 0.181	-0.443 +/- 1.193
CYX 18	R CYX 18	0.000 +/- 0.000	-0.104 +/- 0.196	-0.123 +/- 0.170	0.225 +/- 0.192	-0.003 +/- 0.014	-0.006 +/- 0.217
ARG 19	R ARG 19	0.000 +/- 0.000	0.007 +/- 0.460	-5.124 +/- 7.700	4.437 +/- 5.965	-0.030 +/- 0.047	-0.710 +/- 1.790
CYX 20	R CYX 20	0.000 +/- 0.000	-0.102 +/- 0.134	-0.013 +/- 0.329	0.108 +/- 0.292	-0.004 +/- 0.018	-0.011 +/- 0.182
PRO 21	R PRO 21	0.000 +/- 0.000	-0.167 +/- 0.415	0.033 +/- 0.279	-0.026 +/- 0.255	-0.029 +/- 0.081	-0.190 +/- 0.446

SER 22	R SER 22	0.000 +/- 0.000	-0.028 +/- 0.026	0.011 +/- 0.179	0.125 +/- 0.175	-0.000 +/- 0.000	0.108 +/- 0.048
LEU 23	R LEU 23	0.000 +/- 0.000	-0.031 +/- 0.009	0.047 +/- 0.123	0.021 +/- 0.127	0.000 +/- 0.000	0.037 +/- 0.029
ARG 24	R ARG 24	0.000 +/- 0.000	-0.111 +/- 0.156	2.589 +/- 3.068	-2.314 +/- 2.909	-0.014 +/- 0.052	0.151 +/- 0.302
GLN 25	R GLN 25	0.000 +/- 0.000	-0.089 +/- 0.211	-0.128 +/- 0.893	0.283 +/- 0.727	-0.011 +/- 0.044	0.056 +/- 0.395
ALA 26	R ALA 26	0.000 +/- 0.000	-0.019 +/- 0.016	0.092 +/- 0.122	-0.072 +/- 0.122	0.000 +/- 0.000	0.002 +/- 0.027
VAL 27	R VAL 27	0.000 +/- 0.000	-0.046 +/- 0.037	0.079 +/- 0.197	-0.020 +/- 0.208	-0.000 +/- 0.001	0.013 +/- 0.054
GLN 28	R GLN 28	0.000 +/- 0.000	-0.223 +/- 0.455	0.106 +/- 1.057	0.151 +/- 1.104	-0.028 +/- 0.077	0.005 +/- 0.318
SER 29	R SER 29	0.000 +/- 0.000	-0.091 +/- 0.197	0.125 +/- 0.451	0.004 +/- 0.453	-0.006 +/- 0.025	0.032 +/- 0.194
ALA 30	R ALA 30	0.000 +/- 0.000	-0.045 +/- 0.029	-0.103 +/- 0.229	0.182 +/- 0.244	-0.000 +/- 0.000	0.035 +/- 0.057
GLN 31	R GLN 31	0.000 +/- 0.000	-0.921 +/- 0.786	-1.940 +/- 2.995	2.517 +/- 2.609	-0.195 +/- 0.154	-0.540 +/- 1.102
GLN 32	R GLN 32	0.000 +/- 0.000	-1.041 +/- 0.948	-2.019 +/- 2.722	2.361 +/- 2.248	-0.213 +/- 0.172	-0.913 +/- 1.101
GLN 33	R GLN 33	0.000 +/- 0.000	-0.337 +/- 0.680	-0.236 +/- 0.806	0.584 +/- 0.952	-0.037 +/- 0.111	-0.026 +/- 0.513
GLN 34	R GLN 34	0.000 +/- 0.000	-0.294 +/- 0.334	0.030 +/- 0.752	0.512 +/- 0.752	-0.017 +/- 0.049	0.231 +/- 0.320
GLY 35	R GLY 35	0.000 +/- 0.000	-1.127 +/- 0.924	-1.519 +/- 1.664	2.325 +/- 2.045	-0.179 +/- 0.146	-0.501 +/- 0.699
GLN 36	R GLN 36	0.000 +/- 0.000	-2.855 +/- 1.986	-2.105 +/- 2.488	4.318 +/- 3.342	-0.444 +/- 0.292	-1.086 +/- 1.131
VAL 37	R VAL 37	0.000 +/- 0.000	-1.547 +/- 1.232	-1.337 +/- 1.200	2.552 +/- 1.877	-0.122 +/- 0.097	-0.454 +/- 0.715
GLY 38	R GLY 38	0.000 +/- 0.000	-0.990 +/- 0.792	-0.170 +/- 0.640	0.753 +/- 0.652	-0.127 +/- 0.103	-0.535 +/- 0.559
PRO 39	R PRO 39	0.000 +/- 0.000	-1.935 +/- 1.522	-0.136 +/- 0.555	0.126 +/- 0.557	-0.362 +/- 0.277	-2.306 +/- 1.788
GLN 40	R GLN 40	0.000 +/- 0.000	-0.878 +/- 0.975	-2.733 +/- 3.744	2.830 +/- 3.273	-0.191 +/- 0.220	-0.972 +/- 1.536
GLN 41	R GLN 41	0.000 +/- 0.000	-0.329 +/- 0.475	-0.179 +/- 1.453	0.543 +/- 1.348	-0.038 +/- 0.085	-0.002 +/- 0.639
VAL 42	R VAL 42	0.000 +/- 0.000	-0.273 +/- 0.268	0.033 +/- 0.351	0.112 +/- 0.289	-0.020 +/- 0.037	-0.149 +/- 0.265
GLY 43	R GLY 43	0.000 +/- 0.000	-0.074 +/- 0.088	-0.467 +/- 0.311	0.545 +/- 0.306	-0.003 +/- 0.016	0.001 +/- 0.088
HIE 44	R HIE 44	0.000 +/- 0.000	-0.211 +/- 0.387	-0.120 +/- 0.918	0.299 +/- 0.727	-0.031 +/- 0.069	-0.064 +/- 0.363
MET 45	R MET 45	0.000 +/- 0.000	-0.062 +/- 0.022	0.079 +/- 0.241	0.005 +/- 0.228	0.000 +/- 0.000	0.023 +/- 0.037
TYR 46	R TYR 46	0.000 +/- 0.000	-0.161 +/- 0.130	-0.217 +/- 0.885	0.298 +/- 0.601	-0.011 +/- 0.034	-0.091 +/- 0.398
ARG 47	R ARG 47	0.000 +/- 0.000	-0.345 +/- 0.506	1.390 +/- 4.040	-0.956 +/- 3.624	-0.074 +/- 0.119	0.014 +/- 0.619
VAL 48	R VAL 48	0.000 +/- 0.000	-0.094 +/- 0.174	0.059 +/- 0.164	0.005 +/- 0.177	-0.006 +/- 0.019	-0.036 +/- 0.173
ALA 49	R ALA 49	0.000 +/- 0.000	-0.027 +/- 0.011	0.345 +/- 0.153	-0.237 +/- 0.145	0.000 +/- 0.000	0.081 +/- 0.032
SER 50	R SER 50	0.000 +/- 0.000	-0.191 +/- 0.063	1.247 +/- 0.504	-1.139 +/- 0.525	-0.013 +/- 0.012	-0.096 +/- 0.106
ARG 51	R ARG 51	0.000 +/- 0.000	-0.253 +/- 0.690	1.434 +/- 3.744	-1.141 +/- 3.173	-0.052 +/- 0.127	-0.011 +/- 0.567
ILE 52	R ILE 52	0.000 +/- 0.000	-0.037 +/- 0.033	0.170 +/- 0.182	-0.084 +/- 0.180	-0.000 +/- 0.000	0.049 +/- 0.044
PRO 53	R PRO 53	0.000 +/- 0.000	-0.060 +/- 0.042	0.008 +/- 0.261	-0.030 +/- 0.252	-0.000 +/- 0.000	-0.082 +/- 0.076
ALA 54	R ALA 54	0.000 +/- 0.000	-0.109 +/- 0.287	-0.077 +/- 0.521	0.136 +/- 0.592	-0.011 +/- 0.041	-0.061 +/- 0.230
ILE 55	R ILE 55	0.000 +/- 0.000	-0.160 +/- 0.311	0.038 +/- 0.333	0.025 +/- 0.348	-0.029 +/- 0.068	-0.125 +/- 0.331
CYX 56	R CYX 56	0.000 +/- 0.000	-0.059 +/- 0.098	-0.002 +/- 0.238	0.129 +/- 0.261	-0.001 +/- 0.007	0.067 +/- 0.074
ASN 57	R ASN 57	0.000 +/- 0.000	-0.426 +/- 0.913	-0.362 +/- 1.074	0.776 +/- 1.371	-0.078 +/- 0.166	-0.090 +/- 0.545
LEU 58	R LEU 58	0.000 +/- 0.000	-0.376 +/- 0.559	-0.409 +/- 1.046	0.390 +/- 0.825	-0.026 +/- 0.045	-0.421 +/- 0.818
GLN 59	R GLN 59	0.000 +/- 0.000	-0.579 +/- 0.749	-0.441 +/- 1.792	0.788 +/- 1.594	-0.095 +/- 0.134	-0.326 +/- 0.942
PRO 60	R PRO 60	0.000 +/- 0.000	-0.813 +/- 0.477	-1.828 +/- 1.097	1.393 +/- 0.759	-0.117 +/- 0.074	-1.365 +/- 0.901
MET 61	R MET 61	0.000 +/- 0.000	-0.718 +/- 0.529	-2.550 +/- 1.559	2.236 +/- 1.183	-0.118 +/- 0.094	-1.150 +/- 0.879
ARG 62	R ARG 62	0.000 +/- 0.000	-2.048 +/- 0.889	0.807 +/- 3.633	0.102 +/- 3.084	-0.349 +/- 0.159	-1.488 +/- 0.977
CYX 63	R CYX 63	0.000 +/- 0.000	-1.384 +/- 0.418	-0.926 +/- 0.464	2.225 +/- 0.626	-0.065 +/- 0.025	-0.151 +/- 0.319
PRO 64	R PRO 64	0.000 +/- 0.000	-2.361 +/- 0.490	-0.076 +/- 0.966	0.824 +/- 1.095	-0.369 +/- 0.074	-1.982 +/- 0.502

PHE 65	R PHE 65	0.000 +/- 0.000	-0.559 +/- 0.944	-31.511 +/- 6.030	29.262 +/- 5.396	-0.392 +/- 0.067	-3.200 +/- 1.149
GLN 66	R GLN 66	0.000 +/- 0.000	-0.292 +/- 0.600	-2.604 +/- 8.367	3.634 +/- 9.500	-0.072 +/- 0.136	0.667 +/- 1.064
ARG 67	R ARG 67	0.000 +/- 0.000	-0.446 +/- 1.140	0.192 +/- 4.389	0.113 +/- 4.154	-0.082 +/- 0.226	-0.223 +/- 0.980
CYX 68	R CYX 68	0.000 +/- 0.000	-0.139 +/- 0.298	-0.224 +/- 0.421	0.311 +/- 0.380	-0.012 +/- 0.037	-0.063 +/- 0.300
ARG 69	R ARG 69	0.000 +/- 0.000	-0.378 +/- 0.595	-2.921 +/- 6.603	3.045 +/- 5.984	-0.075 +/- 0.137	-0.328 +/- 1.104
HIE 70	R HIE 70	0.000 +/- 0.000	-1.392 +/- 1.655	-1.090 +/- 1.951	1.492 +/- 1.737	-0.231 +/- 0.218	-1.221 +/- 1.430
GLN 71	R GLN 71	0.000 +/- 0.000	-0.291 +/- 0.375	-0.361 +/- 1.118	0.368 +/- 0.844	-0.025 +/- 0.061	-0.310 +/- 0.480
PHE 72	R PHE 72	0.000 +/- 0.000	-0.198 +/- 0.089	-0.111 +/- 0.342	0.063 +/- 0.381	-0.001 +/- 0.005	-0.247 +/- 0.161
GLN 73	R GLN 73	0.000 +/- 0.000	-2.279 +/- 1.014	-2.535 +/- 2.364	3.900 +/- 2.235	-0.312 +/- 0.137	-1.225 +/- 0.989
THR 74	R THR 74	0.000 +/- 0.000	-2.949 +/- 0.817	-1.976 +/- 1.306	3.543 +/- 1.195	-0.415 +/- 0.079	-1.797 +/- 0.962
GLN 75	R GLN 75	0.000 +/- 0.000	-1.062 +/- 0.684	-0.738 +/- 2.259	0.773 +/- 1.197	-0.108 +/- 0.078	-1.135 +/- 1.855
GLN 76	R GLN 76	0.000 +/- 0.000	-2.236 +/- 1.242	-1.315 +/- 2.779	2.413 +/- 2.263	-0.392 +/- 0.169	-1.531 +/- 1.346
ARG 77	R ARG 77	0.000 +/- 0.000	-0.559 +/- 0.647	-5.451 +/- 9.199	5.202 +/- 7.751	-0.146 +/- 0.122	-0.954 +/- 1.602
LEU 78	R LEU 78	0.000 +/- 0.000	-0.083 +/- 0.036	-0.110 +/- 0.232	0.206 +/- 0.241	-0.000 +/- 0.000	0.013 +/- 0.054
ARG 79	R ARG 79	0.000 +/- 0.000	-0.207 +/- 0.275	-3.656 +/- 5.475	3.892 +/- 5.095	-0.046 +/- 0.073	-0.018 +/- 0.717
ALA 80	R ALA 80	0.000 +/- 0.000	-0.039 +/- 0.043	-0.382 +/- 0.294	0.473 +/- 0.330	-0.000 +/- 0.002	0.052 +/- 0.056
CYX 81	R CYX 81	0.000 +/- 0.000	-0.019 +/- 0.007	-0.200 +/- 0.186	0.295 +/- 0.223	0.000 +/- 0.000	0.077 +/- 0.046
GLN 82	R GLN 82	0.000 +/- 0.000	-0.038 +/- 0.055	-0.351 +/- 0.519	0.517 +/- 0.474	-0.001 +/- 0.007	0.127 +/- 0.210
ARG 83	R ARG 83	0.000 +/- 0.000	-0.029 +/- 0.047	-1.314 +/- 1.748	1.432 +/- 1.746	-0.002 +/- 0.018	0.087 +/- 0.109
VAL 84	R VAL 84	0.000 +/- 0.000	-0.032 +/- 0.054	-0.225 +/- 0.211	0.298 +/- 0.250	-0.000 +/- 0.000	0.041 +/- 0.035
ILE 85	R ILE 85	0.000 +/- 0.000	-0.027 +/- 0.023	-0.169 +/- 0.183	0.210 +/- 0.171	0.000 +/- 0.000	0.013 +/- 0.055
GLN 86	R GLN 86	0.000 +/- 0.000	-0.038 +/- 0.044	-0.026 +/- 0.397	0.122 +/- 0.358	-0.001 +/- 0.009	0.057 +/- 0.114
ARG 87	R ARG 87	0.000 +/- 0.000	-0.128 +/- 0.347	-0.042 +/- 1.292	0.220 +/- 1.117	-0.013 +/- 0.046	0.036 +/- 0.176
TRP 88	R TRP 88	0.000 +/- 0.000	-0.921 +/- 2.060	-0.533 +/- 1.248	0.580 +/- 1.195	-0.100 +/- 0.220	-0.974 +/- 2.280
SER 89	R SER 89	0.000 +/- 0.000	-0.129 +/- 0.276	-0.056 +/- 0.506	0.176 +/- 0.357	-0.004 +/- 0.017	-0.013 +/- 0.261
GLN 90	R GLN 90	0.000 +/- 0.000	-0.089 +/- 0.556	-3.870 +/- 6.929	3.702 +/- 6.117	-0.064 +/- 0.141	-0.320 +/- 1.128
LIG 91	L LIG 1	0.000 +/- 0.000	-4.625 +/- 2.409	-6.649 +/- 7.253	9.881 +/- 6.929	-0.674 +/- 0.410	-2.067 +/- 1.712
LIG 92	L LIG 2	0.000 +/- 0.000	-4.824 +/- 3.564	-18.086 +/- 14.491	20.553 +/- 13.657	-0.932 +/- 0.612	-3.288 +/- 3.722
LIG 93	L LIG 3	0.000 +/- 0.000	-3.609 +/- 2.523	-5.376 +/- 6.017	9.455 +/- 6.678	-0.509 +/- 0.349	-0.039 +/- 1.296
LIG 94	L LIG 4	0.000 +/- 0.000	-8.037 +/- 1.969	-27.560 +/- 6.805	27.407 +/- 6.614	-1.441 +/- 0.248	-9.631 +/- 2.034
LIG 95	L LIG 5	0.000 +/- 0.000	-2.769 +/- 2.817	-8.087 +/- 9.195	10.680 +/- 7.905	-0.467 +/- 0.620	-0.642 +/- 3.143
LIG 96	L LIG 6	0.000 +/- 0.000	-5.911 +/- 3.087	-13.759 +/- 11.276	18.289 +/- 10.947	-0.970 +/- 0.509	-2.350 +/- 3.329
LIG 97	L LIG 7	0.000 +/- 0.000	-5.742 +/- 3.535	-9.249 +/- 8.145	13.644 +/- 9.180	-0.929 +/- 0.606	-2.275 +/- 2.656
LIG 98	L LIG 8	0.000 +/- 0.000	-1.800 +/- 2.527	-2.505 +/- 7.428	4.666 +/- 8.143	-0.334 +/- 0.515	0.027 +/- 1.366
LIG 99	L LIG 9	0.000 +/- 0.000	-1.513 +/- 1.282	-2.202 +/- 3.928	4.326 +/- 4.052	-0.242 +/- 0.226	0.369 +/- 1.092
LIG 100	L LIG 10	0.000 +/- 0.000	-4.114 +/- 3.838	-14.548 +/- 10.150	17.437 +/- 8.972	-0.636 +/- 0.573	-1.862 +/- 2.572

Table S3: Total Energy Decomposition of MO-BR9 complex

Residue	Location	Internal	van der Waals	Electrostatic	Polar Solvation	Non-Polar Solv.	TOTAL
PRO 1	R PRO 1	0.000 +/- 0.000	-0.439 +/- 0.574	-0.169 +/- 0.388	0.661 +/- 0.642	-0.096 +/- 0.137	-0.042 +/- 0.393
PRO 2	R PRO 2	0.000 +/- 0.000	-0.150 +/- 0.086	0.013 +/- 0.043	0.042 +/- 0.064	-0.004 +/- 0.021	-0.099 +/- 0.103
THR 3	R THR 3	0.000 +/- 0.000	-1.570 +/- 0.667	0.079 +/- 0.172	0.960 +/- 0.436	-0.200 +/- 0.087	-0.731 +/- 0.444

LEU 4	R LEU 4	0.000 +/- 0.000	-2.227 +/- 0.630	-0.060 +/- 0.115	0.184 +/- 0.164	-0.349 +/- 0.105	-2.452 +/- 0.678
GLN 5	R GLN 5	0.000 +/- 0.000	-0.122 +/- 0.138	-0.001 +/- 0.041	0.127 +/- 0.098	-0.004 +/- 0.024	-0.001 +/- 0.128
ARG 6	R ARG 6	0.000 +/- 0.000	-0.076 +/- 0.027	0.004 +/- 0.156	0.220 +/- 0.178	-0.000 +/- 0.001	0.148 +/- 0.066
CYX 7	R CYX 7	0.000 +/- 0.000	-0.489 +/- 0.214	0.068 +/- 0.077	0.110 +/- 0.065	-0.011 +/- 0.010	-0.322 +/- 0.181
CYX 8	R CYX 8	0.000 +/- 0.000	-0.112 +/- 0.110	0.010 +/- 0.037	0.058 +/- 0.050	-0.004 +/- 0.018	-0.049 +/- 0.107
ARG 9	R ARG 9	0.000 +/- 0.000	-0.018 +/- 0.009	-0.043 +/- 0.119	0.133 +/- 0.126	-0.000 +/- 0.001	0.071 +/- 0.024
GLN 10	R GLN 10	0.000 +/- 0.000	-0.021 +/- 0.005	0.012 +/- 0.013	0.058 +/- 0.023	0.000 +/- 0.000	0.048 +/- 0.019
LEU 11	R LEU 11	0.000 +/- 0.000	-0.041 +/- 0.013	-0.001 +/- 0.013	0.038 +/- 0.017	0.000 +/- 0.000	-0.004 +/- 0.015
ARG 12	R ARG 12	0.000 +/- 0.000	-0.012 +/- 0.005	-0.079 +/- 0.131	0.137 +/- 0.133	-0.000 +/- 0.000	0.046 +/- 0.028
ASN 13	R ASN 13	0.000 +/- 0.000	-0.004 +/- 0.001	-0.003 +/- 0.009	0.042 +/- 0.016	0.000 +/- 0.000	0.034 +/- 0.010
VAL 14	R VAL 14	0.000 +/- 0.000	-0.010 +/- 0.003	-0.001 +/- 0.008	0.036 +/- 0.014	0.000 +/- 0.000	0.025 +/- 0.010
SER 15	R SER 15	0.000 +/- 0.000	-0.005 +/- 0.003	0.009 +/- 0.015	-0.008 +/- 0.019	0.000 +/- 0.000	-0.004 +/- 0.011
PRO 16	R PRO 16	0.000 +/- 0.000	-0.014 +/- 0.037	0.008 +/- 0.022	0.011 +/- 0.036	-0.001 +/- 0.008	0.005 +/- 0.026
PHE 17	R PHE 17	0.000 +/- 0.000	-0.029 +/- 0.040	0.001 +/- 0.020	0.071 +/- 0.044	-0.003 +/- 0.014	0.041 +/- 0.037
CYX 18	R CYX 18	0.000 +/- 0.000	-0.024 +/- 0.014	0.017 +/- 0.023	0.005 +/- 0.033	0.000 +/- 0.000	-0.002 +/- 0.023
ARG 19	R ARG 19	0.000 +/- 0.000	-0.036 +/- 0.016	-0.091 +/- 0.136	0.230 +/- 0.149	-0.000 +/- 0.001	0.104 +/- 0.041
CYX 20	R CYX 20	0.000 +/- 0.000	-0.151 +/- 0.129	0.064 +/- 0.064	0.009 +/- 0.083	-0.006 +/- 0.021	-0.084 +/- 0.121
PRO 21	R PRO 21	0.000 +/- 0.000	-0.463 +/- 0.370	0.103 +/- 0.230	0.055 +/- 0.206	-0.071 +/- 0.069	-0.375 +/- 0.343
SER 22	R SER 22	0.000 +/- 0.000	-0.102 +/- 0.062	0.007 +/- 0.033	0.077 +/- 0.058	-0.000 +/- 0.000	-0.018 +/- 0.050
LEU 23	R LEU 23	0.000 +/- 0.000	-0.177 +/- 0.075	-0.034 +/- 0.064	0.031 +/- 0.081	-0.000 +/- 0.000	-0.180 +/- 0.096
ARG 24	R ARG 24	0.000 +/- 0.000	-3.360 +/- 1.586	-0.655 +/- 0.852	2.500 +/- 1.218	-0.469 +/- 0.199	-1.983 +/- 1.393
GLN 25	R GLN 25	0.000 +/- 0.000	-1.321 +/- 0.697	-0.092 +/- 0.241	0.605 +/- 0.443	-0.145 +/- 0.092	-0.954 +/- 0.600
ALA 26	R ALA 26	0.000 +/- 0.000	-0.132 +/- 0.034	-0.024 +/- 0.031	0.014 +/- 0.067	0.000 +/- 0.000	-0.141 +/- 0.059
VAL 27	R VAL 27	0.000 +/- 0.000	-1.151 +/- 0.528	-0.009 +/- 0.111	0.074 +/- 0.169	-0.060 +/- 0.041	-1.145 +/- 0.464
GLN 28	R GLN 28	0.000 +/- 0.000	-3.437 +/- 0.725	-0.093 +/- 0.464	1.983 +/- 0.975	-0.512 +/- 0.096	-2.059 +/- 0.728
SER 29	R SER 29	0.000 +/- 0.000	-0.306 +/- 0.316	-0.054 +/- 0.138	0.436 +/- 0.273	-0.014 +/- 0.032	0.061 +/- 0.273
ALA 30	R ALA 30	0.000 +/- 0.000	-0.092 +/- 0.026	-0.011 +/- 0.030	0.146 +/- 0.059	0.000 +/- 0.000	0.043 +/- 0.070
GLN 31	R GLN 31	0.000 +/- 0.000	-2.102 +/- 0.787	-0.190 +/- 0.364	1.780 +/- 0.960	-0.268 +/- 0.099	-0.779 +/- 0.564
GLN 32	R GLN 32	0.000 +/- 0.000	-0.745 +/- 1.007	0.003 +/- 0.160	0.815 +/- 0.778	-0.114 +/- 0.197	-0.041 +/- 0.618
GLN 33	R GLN 33	0.000 +/- 0.000	-0.056 +/- 0.055	-0.002 +/- 0.024	0.245 +/- 0.077	-0.000 +/- 0.002	0.188 +/- 0.057
GLN 34	R GLN 34	0.000 +/- 0.000	-0.058 +/- 0.040	0.004 +/- 0.030	0.245 +/- 0.068	-0.000 +/- 0.000	0.191 +/- 0.061
GLY 35	R GLY 35	0.000 +/- 0.000	-0.090 +/- 0.229	-0.004 +/- 0.100	0.207 +/- 0.271	-0.008 +/- 0.031	0.104 +/- 0.115
GLN 36	R GLN 36	0.000 +/- 0.000	-0.582 +/- 0.768	0.035 +/- 0.253	0.724 +/- 0.694	-0.089 +/- 0.142	0.089 +/- 0.544
VAL 37	R VAL 37	0.000 +/- 0.000	-0.522 +/- 0.283	-0.094 +/- 0.239	0.543 +/- 0.391	-0.024 +/- 0.032	-0.098 +/- 0.296
GLY 38	R GLY 38	0.000 +/- 0.000	-0.674 +/- 0.307	-0.202 +/- 0.218	0.533 +/- 0.276	-0.051 +/- 0.041	-0.394 +/- 0.319
PRO 39	R PRO 39	0.000 +/- 0.000	-3.974 +/- 1.068	-0.347 +/- 0.367	1.072 +/- 0.420	-0.676 +/- 0.135	-3.925 +/- 1.128
GLN 40	R GLN 40	0.000 +/- 0.000	-1.874 +/- 0.979	-0.083 +/- 0.290	1.091 +/- 0.626	-0.258 +/- 0.147	-1.124 +/- 0.822
GLN 41	R GLN 41	0.000 +/- 0.000	-0.332 +/- 0.101	-0.002 +/- 0.079	0.251 +/- 0.124	-0.000 +/- 0.001	-0.084 +/- 0.131
VAL 42	R VAL 42	0.000 +/- 0.000	-2.715 +/- 0.702	-0.035 +/- 0.178	0.252 +/- 0.253	-0.278 +/- 0.106	-2.776 +/- 0.783
GLY 43	R GLY 43	0.000 +/- 0.000	-1.634 +/- 0.533	-0.094 +/- 0.269	0.668 +/- 0.334	-0.229 +/- 0.055	-1.289 +/- 0.492
HIE 44	R HIE 44	0.000 +/- 0.000	-0.996 +/- 0.653	-0.048 +/- 0.222	0.759 +/- 0.587	-0.100 +/- 0.090	-0.385 +/- 0.384
MET 45	R MET 45	0.000 +/- 0.000	-0.341 +/- 0.093	0.019 +/- 0.055	-0.021 +/- 0.088	-0.000 +/- 0.001	-0.344 +/- 0.116
TYR 46	R TYR 46	0.000 +/- 0.000	-3.770 +/- 0.844	-0.067 +/- 0.325	1.554 +/- 0.546	-0.466 +/- 0.126	-2.749 +/- 0.766

ARG 47	R ARG 47	0.000 +/- 0.000	-2.326 +/- 1.249	-0.260 +/- 0.644	2.234 +/- 1.293	-0.351 +/- 0.194	-0.703 +/- 0.856
VAL 48	R VAL 48	0.000 +/- 0.000	-1.147 +/- 0.901	0.013 +/- 0.107	0.044 +/- 0.131	-0.085 +/- 0.086	-1.175 +/- 0.918
ALA 49	R ALA 49	0.000 +/- 0.000	-0.166 +/- 0.064	0.014 +/- 0.045	0.095 +/- 0.068	-0.000 +/- 0.001	-0.058 +/- 0.061
SER 50	R SER 50	0.000 +/- 0.000	-0.311 +/- 0.285	-0.037 +/- 0.150	0.411 +/- 0.401	-0.021 +/- 0.043	0.042 +/- 0.177
ARG 51	R ARG 51	0.000 +/- 0.000	-2.485 +/- 1.117	-0.372 +/- 0.744	2.190 +/- 1.138	-0.359 +/- 0.159	-1.027 +/- 0.880
ILE 52	R ILE 52	0.000 +/- 0.000	-0.903 +/- 0.374	-0.027 +/- 0.109	0.103 +/- 0.103	-0.023 +/- 0.017	-0.850 +/- 0.372
PRO 53	R PRO 53	0.000 +/- 0.000	-0.133 +/- 0.070	0.006 +/- 0.035	0.039 +/- 0.048	-0.000 +/- 0.000	-0.088 +/- 0.084
ALA 54	R ALA 54	0.000 +/- 0.000	-0.500 +/- 0.611	-0.028 +/- 0.145	0.174 +/- 0.208	-0.084 +/- 0.110	-0.437 +/- 0.609
ILE 55	R ILE 55	0.000 +/- 0.000	-3.073 +/- 1.012	-0.043 +/- 0.151	0.346 +/- 0.269	-0.533 +/- 0.145	-3.302 +/- 1.037
CYX 56	R CYX 56	0.000 +/- 0.000	-0.363 +/- 0.197	-0.014 +/- 0.043	0.182 +/- 0.068	-0.010 +/- 0.017	-0.204 +/- 0.184
ASN 57	R ASN 57	0.000 +/- 0.000	-0.124 +/- 0.215	-0.029 +/- 0.130	0.276 +/- 0.284	-0.018 +/- 0.051	0.106 +/- 0.123
LEU 58	R LEU 58	0.000 +/- 0.000	-0.037 +/- 0.020	0.009 +/- 0.021	0.049 +/- 0.026	-0.000 +/- 0.000	0.021 +/- 0.019
GLN 59	R GLN 59	0.000 +/- 0.000	-0.053 +/- 0.148	-0.011 +/- 0.146	0.095 +/- 0.204	-0.008 +/- 0.032	0.023 +/- 0.116
PRO 60	R PRO 60	0.000 +/- 0.000	-0.163 +/- 0.447	0.005 +/- 0.051	0.070 +/- 0.094	-0.023 +/- 0.075	-0.111 +/- 0.467
MET 61	R MET 61	0.000 +/- 0.000	-0.388 +/- 0.639	-0.011 +/- 0.161	0.278 +/- 0.426	-0.050 +/- 0.093	-0.172 +/- 0.416
ARG 62	R ARG 62	0.000 +/- 0.000	-0.754 +/- 1.276	-0.132 +/- 0.465	0.681 +/- 1.060	-0.122 +/- 0.200	-0.326 +/- 0.786
CYX 63	R CYX 63	0.000 +/- 0.000	-0.230 +/- 0.401	-0.006 +/- 0.104	0.191 +/- 0.304	-0.011 +/- 0.027	-0.056 +/- 0.221
PRO 64	R PRO 64	0.000 +/- 0.000	-0.336 +/- 0.665	-0.010 +/- 0.086	0.129 +/- 0.208	-0.049 +/- 0.125	-0.265 +/- 0.682
PHE 65	R PHE 65	0.000 +/- 0.000	-0.913 +/- 0.708	-0.135 +/- 0.619	1.572 +/- 1.458	-0.090 +/- 0.119	0.434 +/- 0.734
GLN 66	R GLN 66	0.000 +/- 0.000	-0.095 +/- 0.176	0.035 +/- 0.247	0.344 +/- 0.383	-0.013 +/- 0.043	0.271 +/- 0.184
ARG 67	R ARG 67	0.000 +/- 0.000	-0.015 +/- 0.013	-0.008 +/- 0.117	0.067 +/- 0.115	-0.000 +/- 0.000	0.043 +/- 0.020
CYX 68	R CYX 68	0.000 +/- 0.000	-0.069 +/- 0.091	-0.004 +/- 0.037	0.087 +/- 0.060	-0.002 +/- 0.011	0.012 +/- 0.083
ARG 69	R ARG 69	0.000 +/- 0.000	-0.951 +/- 1.070	-0.135 +/- 0.681	1.435 +/- 1.351	-0.215 +/- 0.234	0.133 +/- 0.440
HIE 70	R HIE 70	0.000 +/- 0.000	-0.013 +/- 0.011	0.003 +/- 0.010	0.013 +/- 0.016	-0.000 +/- 0.000	0.003 +/- 0.008
GLN 71	R GLN 71	0.000 +/- 0.000	-0.011 +/- 0.006	0.005 +/- 0.013	0.039 +/- 0.018	0.000 +/- 0.000	0.032 +/- 0.015
PHE 72	R PHE 72	0.000 +/- 0.000	-0.116 +/- 0.084	-0.001 +/- 0.018	-0.077 +/- 0.040	-0.003 +/- 0.010	-0.197 +/- 0.097
GLN 73	R GLN 73	0.000 +/- 0.000	-0.022 +/- 0.017	-0.002 +/- 0.026	0.050 +/- 0.045	-0.000 +/- 0.003	0.026 +/- 0.023
THR 74	R THR 74	0.000 +/- 0.000	-0.004 +/- 0.002	-0.005 +/- 0.009	0.047 +/- 0.017	0.000 +/- 0.000	0.037 +/- 0.013
GLN 75	R GLN 75	0.000 +/- 0.000	-0.008 +/- 0.002	0.002 +/- 0.011	0.037 +/- 0.015	0.000 +/- 0.000	0.032 +/- 0.013
GLN 76	R GLN 76	0.000 +/- 0.000	-0.008 +/- 0.002	0.002 +/- 0.013	0.051 +/- 0.023	0.000 +/- 0.000	0.045 +/- 0.019
ARG 77	R ARG 77	0.000 +/- 0.000	-0.073 +/- 0.105	-0.061 +/- 0.208	0.309 +/- 0.333	-0.011 +/- 0.028	0.163 +/- 0.201
LEU 78	R LEU 78	0.000 +/- 0.000	-0.033 +/- 0.007	0.010 +/- 0.015	-0.082 +/- 0.031	0.000 +/- 0.000	-0.106 +/- 0.029
ARG 79	R ARG 79	0.000 +/- 0.000	-0.033 +/- 0.008	-0.009 +/- 0.123	0.122 +/- 0.143	0.000 +/- 0.000	0.079 +/- 0.065
ALA 80	R ALA 80	0.000 +/- 0.000	-0.117 +/- 0.043	0.025 +/- 0.052	0.048 +/- 0.071	-0.000 +/- 0.000	-0.044 +/- 0.053
CYX 81	R CYX 81	0.000 +/- 0.000	-0.132 +/- 0.044	0.010 +/- 0.029	0.024 +/- 0.041	-0.000 +/- 0.000	-0.099 +/- 0.050
GLN 82	R GLN 82	0.000 +/- 0.000	-0.079 +/- 0.014	-0.021 +/- 0.030	0.190 +/- 0.063	0.000 +/- 0.000	0.091 +/- 0.052
ARG 83	R ARG 83	0.000 +/- 0.000	-0.829 +/- 0.470	-0.011 +/- 0.322	0.863 +/- 0.633	-0.083 +/- 0.058	-0.060 +/- 0.373
VAL 84	R VAL 84	0.000 +/- 0.000	-2.165 +/- 0.519	-0.149 +/- 0.123	0.377 +/- 0.163	-0.200 +/- 0.049	-2.137 +/- 0.551
ILE 85	R ILE 85	0.000 +/- 0.000	-0.224 +/- 0.045	-0.030 +/- 0.036	0.131 +/- 0.069	0.000 +/- 0.000	-0.123 +/- 0.047
GLN 86	R GLN 86	0.000 +/- 0.000	-0.117 +/- 0.033	0.003 +/- 0.036	0.226 +/- 0.090	-0.000 +/- 0.002	0.111 +/- 0.082
ARG 87	R ARG 87	0.000 +/- 0.000	-2.030 +/- 0.873	0.179 +/- 0.559	1.292 +/- 1.051	-0.314 +/- 0.132	-0.874 +/- 0.657
TRP 88	R TRP 88	0.000 +/- 0.000	-4.859 +/- 0.893	-0.320 +/- 0.324	2.483 +/- 0.661	-0.704 +/- 0.167	-3.400 +/- 0.678
SER 89	R SER 89	0.000 +/- 0.000	-0.124 +/- 0.053	0.010 +/- 0.033	0.192 +/- 0.073	-0.000 +/- 0.001	0.078 +/- 0.061

GLN 90	R GLN 90	0.000 +/- 0.000	-0.170 +/- 0.273	-0.146 +/- 0.242	0.613 +/- 0.527	-0.023 +/- 0.059	0.274 +/- 0.258
LIG 91	L LIG 1	0.000 +/- 0.000	-6.746 +/- 3.152	-0.322 +/- 0.687	0.898 +/- 0.650	-0.966 +/- 0.471	-7.135 +/- 3.451
LIG 92	L LIG 2	0.000 +/- 0.000	-6.748 +/- 2.632	-0.261 +/- 0.804	1.166 +/- 0.737	-0.924 +/- 0.406	-6.767 +/- 2.822
LIG 93	L LIG 3	0.000 +/- 0.000	-6.033 +/- 2.235	-0.371 +/- 0.567	0.960 +/- 0.550	-0.850 +/- 0.327	-6.293 +/- 2.405
LIG 94	L LIG 4	0.000 +/- 0.000	-6.593 +/- 2.423	-0.915 +/- 0.769	1.477 +/- 0.781	-1.036 +/- 0.399	-7.068 +/- 2.649
LIG 95	L LIG 5	0.000 +/- 0.000	-2.905 +/- 3.297	-0.099 +/- 0.717	0.571 +/- 0.822	-0.422 +/- 0.545	-2.855 +/- 3.595
LIG 96	L LIG 6	0.000 +/- 0.000	-5.548 +/- 1.526	-0.371 +/- 0.843	1.329 +/- 0.789	-0.861 +/- 0.258	-5.450 +/- 1.663
LIG 97	L LIG 7	0.000 +/- 0.000	-12.865 +/- 2.077	0.025 +/- 0.606	1.327 +/- 0.565	-2.094 +/- 0.312	-13.606 +/- 2.302
LIG 98	L LIG 8	0.000 +/- 0.000	-2.722 +/- 2.134	-0.227 +/- 0.625	0.650 +/- 0.684	-0.243 +/- 0.246	-2.543 +/- 2.177
LIG 99	L LIG 9	0.000 +/- 0.000	-9.925 +/- 3.021	-0.907 +/- 0.967	1.904 +/- 0.926	-1.587 +/- 0.435	-10.515 +/- 3.287
LIG 100	L LIG 10	0.000 +/- 0.000	-3.177 +/- 2.551	-0.371 +/- 0.790	0.792 +/- 0.793	-0.451 +/- 0.390	-3.208 +/- 2.824

Table S4: Total Energy Decomposition of MO-Pst complex

Residue	Location	Internal	van der Waals	Electrostatic	Polar Solvation	Non-Polar Solv.	TOTAL
PRO 1	R PRO 1	0.000 +/- 0.000	-0.066 +/- 0.189	-0.034 +/- 0.157	0.221 +/- 0.314	-0.012 +/- 0.053	0.108 +/- 0.162
PRO 2	R PRO 2	0.000 +/- 0.000	-0.168 +/- 0.209	-0.002 +/- 0.049	0.052 +/- 0.076	-0.023 +/- 0.054	-0.141 +/- 0.249
THR 3	R THR 3	0.000 +/- 0.000	-0.767 +/- 0.602	-0.053 +/- 0.155	0.550 +/- 0.436	-0.129 +/- 0.109	-0.398 +/- 0.411
LEU 4	R LEU 4	0.000 +/- 0.000	-1.714 +/- 0.940	-0.079 +/- 0.142	0.304 +/- 0.284	-0.317 +/- 0.168	-1.806 +/- 0.957
GLN 5	R GLN 5	0.000 +/- 0.000	-0.572 +/- 0.725	-0.017 +/- 0.131	0.323 +/- 0.438	-0.095 +/- 0.129	-0.361 +/- 0.602
ARG 6	R ARG 6	0.000 +/- 0.000	-0.212 +/- 0.471	-0.075 +/- 0.203	0.351 +/- 0.516	-0.027 +/- 0.085	0.037 +/- 0.299
CYX 7	R CYX 7	0.000 +/- 0.000	-0.235 +/- 0.210	-0.010 +/- 0.052	0.086 +/- 0.056	-0.007 +/- 0.011	-0.164 +/- 0.196
CYX 8	R CYX 8	0.000 +/- 0.000	-0.325 +/- 0.375	-0.005 +/- 0.076	0.108 +/- 0.114	-0.052 +/- 0.066	-0.275 +/- 0.369
ARG 9	R ARG 9	0.000 +/- 0.000	-0.198 +/- 0.545	-0.031 +/- 0.194	0.223 +/- 0.513	-0.031 +/- 0.099	-0.037 +/- 0.342
GLN 10	R GLN 10	0.000 +/- 0.000	-0.055 +/- 0.145	-0.001 +/- 0.044	0.070 +/- 0.099	-0.004 +/- 0.018	0.010 +/- 0.117
LEU 11	R LEU 11	0.000 +/- 0.000	-0.048 +/- 0.026	0.003 +/- 0.012	0.027 +/- 0.021	-0.000 +/- 0.000	-0.018 +/- 0.027
ARG 12	R ARG 12	0.000 +/- 0.000	-0.141 +/- 0.415	-0.010 +/- 0.194	0.217 +/- 0.489	-0.027 +/- 0.085	0.039 +/- 0.226
ASN 13	R ASN 13	0.000 +/- 0.000	-0.070 +/- 0.254	-0.002 +/- 0.054	0.105 +/- 0.227	-0.013 +/- 0.052	0.021 +/- 0.146
VAL 14	R VAL 14	0.000 +/- 0.000	-0.040 +/- 0.081	0.003 +/- 0.019	0.020 +/- 0.028	-0.000 +/- 0.001	-0.016 +/- 0.070
SER 15	R SER 15	0.000 +/- 0.000	-0.079 +/- 0.221	-0.003 +/- 0.056	0.042 +/- 0.127	-0.009 +/- 0.035	-0.049 +/- 0.166
PRO 16	R PRO 16	0.000 +/- 0.000	-0.389 +/- 0.513	-0.010 +/- 0.108	0.157 +/- 0.225	-0.070 +/- 0.094	-0.312 +/- 0.476
PHE 17	R PHE 17	0.000 +/- 0.000	-0.474 +/- 0.626	-0.016 +/- 0.072	0.202 +/- 0.254	-0.107 +/- 0.143	-0.395 +/- 0.569
CYX 18	R CYX 18	0.000 +/- 0.000	-0.135 +/- 0.215	-0.017 +/- 0.038	0.049 +/- 0.051	-0.004 +/- 0.015	-0.107 +/- 0.211
ARG 19	R ARG 19	0.000 +/- 0.000	-0.123 +/- 0.108	-0.021 +/- 0.133	0.276 +/- 0.215	-0.002 +/- 0.011	0.130 +/- 0.078
CYX 20	R CYX 20	0.000 +/- 0.000	-0.463 +/- 0.648	0.019 +/- 0.132	0.209 +/- 0.307	-0.052 +/- 0.089	-0.287 +/- 0.480
PRO 21	R PRO 21	0.000 +/- 0.000	-0.586 +/- 0.574	0.078 +/- 0.137	0.135 +/- 0.193	-0.082 +/- 0.090	-0.454 +/- 0.549
SER 22	R SER 22	0.000 +/- 0.000	-0.292 +/- 0.292	-0.007 +/- 0.044	0.132 +/- 0.111	-0.008 +/- 0.011	-0.174 +/- 0.236
LEU 23	R LEU 23	0.000 +/- 0.000	-0.392 +/- 0.577	-0.021 +/- 0.109	0.070 +/- 0.128	-0.019 +/- 0.036	-0.362 +/- 0.583
ARG 24	R ARG 24	0.000 +/- 0.000	-0.987 +/- 1.092	-0.140 +/- 0.391	0.670 +/- 0.843	-0.159 +/- 0.178	-0.615 +/- 0.845
GLN 25	R GLN 25	0.000 +/- 0.000	-0.885 +/- 0.811	-0.027 +/- 0.232	0.463 +/- 0.479	-0.154 +/- 0.143	-0.602 +/- 0.654
ALA 26	R ALA 26	0.000 +/- 0.000	-0.054 +/- 0.036	0.003 +/- 0.021	0.005 +/- 0.031	-0.000 +/- 0.000	-0.045 +/- 0.046
VAL 27	R VAL 27	0.000 +/- 0.000	-0.157 +/- 0.164	-0.000 +/- 0.032	-0.012 +/- 0.049	-0.002 +/- 0.007	-0.171 +/- 0.181
GLN 28	R GLN 28	0.000 +/- 0.000	-0.198 +/- 0.346	-0.001 +/- 0.082	0.217 +/- 0.271	-0.029 +/- 0.069	-0.012 +/- 0.257

SER 29	R SER 29	0.000 +/- 0.000	-0.089 +/- 0.152	0.010 +/- 0.044	0.092 +/- 0.107	-0.004 +/- 0.022	0.008 +/- 0.109
ALA 30	R ALA 30	0.000 +/- 0.000	-0.304 +/- 0.406	0.031 +/- 0.099	0.095 +/- 0.114	-0.023 +/- 0.035	-0.201 +/- 0.334
GLN 31	R GLN 31	0.000 +/- 0.000	-0.153 +/- 0.258	0.003 +/- 0.067	0.159 +/- 0.196	-0.015 +/- 0.045	-0.006 +/- 0.186
GLN 32	R GLN 32	0.000 +/- 0.000	-0.093 +/- 0.268	-0.011 +/- 0.056	0.125 +/- 0.189	-0.013 +/- 0.057	0.007 +/- 0.196
GLN 33	R GLN 33	0.000 +/- 0.000	-0.532 +/- 0.740	-0.081 +/- 0.192	0.395 +/- 0.483	-0.086 +/- 0.124	-0.304 +/- 0.572
GLN 34	R GLN 34	0.000 +/- 0.000	-0.465 +/- 0.598	-0.044 +/- 0.128	0.347 +/- 0.411	-0.065 +/- 0.095	-0.227 +/- 0.425
GLY 35	R GLY 35	0.000 +/- 0.000	-0.026 +/- 0.078	-0.004 +/- 0.030	0.041 +/- 0.067	-0.002 +/- 0.019	0.008 +/- 0.064
GLN 36	R GLN 36	0.000 +/- 0.000	-0.082 +/- 0.275	-0.007 +/- 0.066	0.105 +/- 0.231	-0.018 +/- 0.069	-0.003 +/- 0.182
VAL 37	R VAL 37	0.000 +/- 0.000	-0.118 +/- 0.229	-0.010 +/- 0.047	0.078 +/- 0.138	-0.010 +/- 0.028	-0.060 +/- 0.211
GLY 38	R GLY 38	0.000 +/- 0.000	-0.068 +/- 0.151	0.010 +/- 0.061	0.014 +/- 0.097	-0.006 +/- 0.024	-0.050 +/- 0.125
PRO 39	R PRO 39	0.000 +/- 0.000	-0.355 +/- 0.528	0.012 +/- 0.121	0.142 +/- 0.216	-0.081 +/- 0.122	-0.283 +/- 0.517
GLN 40	R GLN 40	0.000 +/- 0.000	-0.449 +/- 0.754	-0.004 +/- 0.129	0.292 +/- 0.468	-0.084 +/- 0.149	-0.245 +/- 0.545
GLN 41	R GLN 41	0.000 +/- 0.000	-0.337 +/- 0.724	-0.012 +/- 0.100	0.168 +/- 0.326	-0.037 +/- 0.094	-0.218 +/- 0.590
VAL 42	R VAL 42	0.000 +/- 0.000	-0.358 +/- 0.437	-0.003 +/- 0.068	0.015 +/- 0.058	-0.037 +/- 0.057	-0.384 +/- 0.497
GLY 43	R GLY 43	0.000 +/- 0.000	-0.410 +/- 0.482	-0.011 +/- 0.165	0.165 +/- 0.230	-0.068 +/- 0.081	-0.324 +/- 0.435
HIE 44	R HIE 44	0.000 +/- 0.000	-0.787 +/- 0.770	-0.055 +/- 0.177	0.486 +/- 0.501	-0.123 +/- 0.121	-0.479 +/- 0.575
MET 45	R MET 45	0.000 +/- 0.000	-0.268 +/- 0.328	-0.017 +/- 0.051	0.015 +/- 0.095	-0.013 +/- 0.032	-0.285 +/- 0.294
TYR 46	R TYR 46	0.000 +/- 0.000	-1.191 +/- 1.210	-0.064 +/- 0.153	0.422 +/- 0.462	-0.142 +/- 0.152	-0.975 +/- 1.005
ARG 47	R ARG 47	0.000 +/- 0.000	-1.412 +/- 1.249	-0.119 +/- 0.449	1.050 +/- 1.063	-0.236 +/- 0.217	-0.717 +/- 0.868
VAL 48	R VAL 48	0.000 +/- 0.000	-1.126 +/- 0.602	-0.082 +/- 0.113	0.162 +/- 0.167	-0.109 +/- 0.060	-1.155 +/- 0.640
ALA 49	R ALA 49	0.000 +/- 0.000	-0.275 +/- 0.293	-0.010 +/- 0.056	0.125 +/- 0.136	-0.008 +/- 0.013	-0.167 +/- 0.234
SER 50	R SER 50	0.000 +/- 0.000	-0.494 +/- 0.523	-0.009 +/- 0.114	0.305 +/- 0.356	-0.043 +/- 0.074	-0.240 +/- 0.414
ARG 51	R ARG 51	0.000 +/- 0.000	-2.174 +/- 1.348	-0.355 +/- 0.570	1.658 +/- 1.268	-0.369 +/- 0.233	-1.240 +/- 0.952
ILE 52	R ILE 52	0.000 +/- 0.000	-0.739 +/- 0.390	0.041 +/- 0.069	-0.004 +/- 0.088	-0.033 +/- 0.026	-0.734 +/- 0.391
PRO 53	R PRO 53	0.000 +/- 0.000	-0.170 +/- 0.162	0.008 +/- 0.038	0.028 +/- 0.058	-0.003 +/- 0.009	-0.137 +/- 0.154
ALA 54	R ALA 54	0.000 +/- 0.000	-0.253 +/- 0.324	-0.013 +/- 0.081	0.118 +/- 0.152	-0.044 +/- 0.074	-0.193 +/- 0.311
ILE 55	R ILE 55	0.000 +/- 0.000	-1.827 +/- 0.905	-0.043 +/- 0.145	0.316 +/- 0.288	-0.384 +/- 0.186	-1.938 +/- 1.013
CYX 56	R CYX 56	0.000 +/- 0.000	-0.450 +/- 0.412	-0.008 +/- 0.059	0.214 +/- 0.177	-0.039 +/- 0.049	-0.283 +/- 0.348
ASN 57	R ASN 57	0.000 +/- 0.000	-0.256 +/- 0.492	-0.021 +/- 0.143	0.321 +/- 0.422	-0.045 +/- 0.096	-0.001 +/- 0.300
LEU 58	R LEU 58	0.000 +/- 0.000	-0.117 +/- 0.215	0.001 +/- 0.033	0.100 +/- 0.129	-0.003 +/- 0.013	-0.019 +/- 0.118
GLN 59	R GLN 59	0.000 +/- 0.000	-0.511 +/- 0.710	-0.018 +/- 0.108	0.281 +/- 0.386	-0.103 +/- 0.145	-0.351 +/- 0.563
PRO 60	R PRO 60	0.000 +/- 0.000	-0.527 +/- 0.582	-0.015 +/- 0.072	0.129 +/- 0.182	-0.092 +/- 0.105	-0.504 +/- 0.659
MET 61	R MET 61	0.000 +/- 0.000	-0.299 +/- 0.476	-0.004 +/- 0.076	0.188 +/- 0.245	-0.039 +/- 0.090	-0.154 +/- 0.406
ARG 62	R ARG 62	0.000 +/- 0.000	-0.686 +/- 0.898	-0.145 +/- 0.361	0.750 +/- 0.901	-0.125 +/- 0.185	-0.206 +/- 0.575
CYX 63	R CYX 63	0.000 +/- 0.000	-0.522 +/- 0.677	-0.073 +/- 0.162	0.214 +/- 0.253	-0.045 +/- 0.071	-0.426 +/- 0.679
PRO 64	R PRO 64	0.000 +/- 0.000	-0.590 +/- 0.789	-0.030 +/- 0.102	0.138 +/- 0.240	-0.106 +/- 0.149	-0.588 +/- 0.835
PHE 65	R PHE 65	0.000 +/- 0.000	-0.736 +/- 0.864	-0.004 +/- 0.229	0.621 +/- 0.670	-0.131 +/- 0.167	-0.250 +/- 0.538
GLN 66	R GLN 66	0.000 +/- 0.000	-0.156 +/- 0.305	-0.012 +/- 0.112	0.321 +/- 0.436	-0.027 +/- 0.063	0.127 +/- 0.184
ARG 67	R ARG 67	0.000 +/- 0.000	-0.176 +/- 0.495	-0.061 +/- 0.210	0.215 +/- 0.529	-0.030 +/- 0.102	-0.053 +/- 0.304
CYX 68	R CYX 68	0.000 +/- 0.000	-0.439 +/- 0.455	-0.081 +/- 0.132	0.289 +/- 0.302	-0.055 +/- 0.066	-0.286 +/- 0.368
ARG 69	R ARG 69	0.000 +/- 0.000	-1.184 +/- 1.096	-0.247 +/- 0.344	0.682 +/- 0.757	-0.200 +/- 0.186	-0.949 +/- 0.951
HIE 70	R HIE 70	0.000 +/- 0.000	-0.095 +/- 0.226	-0.002 +/- 0.051	0.043 +/- 0.151	-0.011 +/- 0.046	-0.065 +/- 0.168
GLN 71	R GLN 71	0.000 +/- 0.000	-0.085 +/- 0.204	-0.003 +/- 0.052	0.063 +/- 0.143	-0.007 +/- 0.031	-0.033 +/- 0.135

PHE 72	R PHE 72	0.000 +/- 0.000	-0.502 +/- 0.496	0.003 +/- 0.078	0.001 +/- 0.066	-0.027 +/- 0.033	-0.525 +/- 0.493
GLN 73	R GLN 73	0.000 +/- 0.000	-0.149 +/- 0.303	-0.002 +/- 0.073	0.117 +/- 0.220	-0.020 +/- 0.059	-0.053 +/- 0.204
THR 74	R THR 74	0.000 +/- 0.000	-0.053 +/- 0.184	-0.001 +/- 0.033	0.071 +/- 0.119	-0.010 +/- 0.045	0.006 +/- 0.134
GLN 75	R GLN 75	0.000 +/- 0.000	-0.046 +/- 0.145	-0.004 +/- 0.061	0.073 +/- 0.171	-0.005 +/- 0.026	0.017 +/- 0.070
GLN 76	R GLN 76	0.000 +/- 0.000	-0.109 +/- 0.354	-0.002 +/- 0.077	0.104 +/- 0.249	-0.017 +/- 0.062	-0.024 +/- 0.229
ARG 77	R ARG 77	0.000 +/- 0.000	-0.196 +/- 0.428	-0.014 +/- 0.190	0.223 +/- 0.443	-0.033 +/- 0.079	-0.020 +/- 0.283
LEU 78	R LEU 78	0.000 +/- 0.000	-0.046 +/- 0.030	0.001 +/- 0.015	-0.037 +/- 0.025	0.000 +/- 0.000	-0.082 +/- 0.039
ARG 79	R ARG 79	0.000 +/- 0.000	-0.390 +/- 0.722	-0.064 +/- 0.286	0.396 +/- 0.701	-0.062 +/- 0.122	-0.121 +/- 0.463
ALA 80	R ALA 80	0.000 +/- 0.000	-0.119 +/- 0.167	0.013 +/- 0.044	0.016 +/- 0.068	-0.004 +/- 0.016	-0.093 +/- 0.155
CYX 81	R CYX 81	0.000 +/- 0.000	-0.092 +/- 0.052	0.012 +/- 0.022	0.001 +/- 0.032	-0.000 +/- 0.000	-0.079 +/- 0.053
GLN 82	R GLN 82	0.000 +/- 0.000	-0.373 +/- 0.459	0.031 +/- 0.107	0.234 +/- 0.292	-0.020 +/- 0.033	-0.128 +/- 0.250
ARG 83	R ARG 83	0.000 +/- 0.000	-1.422 +/- 1.284	-0.251 +/- 0.477	1.186 +/- 1.107	-0.205 +/- 0.200	-0.692 +/- 0.888
VAL 84	R VAL 84	0.000 +/- 0.000	-1.185 +/- 0.621	0.040 +/- 0.089	0.103 +/- 0.111	-0.107 +/- 0.079	-1.149 +/- 0.680
ILE 85	R ILE 85	0.000 +/- 0.000	-0.275 +/- 0.226	0.033 +/- 0.039	0.014 +/- 0.059	-0.001 +/- 0.005	-0.230 +/- 0.218
GLN 86	R GLN 86	0.000 +/- 0.000	-1.026 +/- 1.099	-0.020 +/- 0.217	0.513 +/- 0.551	-0.132 +/- 0.156	-0.665 +/- 0.852
ARG 87	R ARG 87	0.000 +/- 0.000	-1.587 +/- 1.203	-0.504 +/- 0.480	1.280 +/- 1.021	-0.267 +/- 0.209	-1.079 +/- 0.973
TRP 88	R TRP 88	0.000 +/- 0.000	-3.186 +/- 1.164	-0.058 +/- 0.294	1.593 +/- 0.678	-0.506 +/- 0.191	-2.157 +/- 0.832
SER 89	R SER 89	0.000 +/- 0.000	-0.276 +/- 0.393	-0.017 +/- 0.091	0.262 +/- 0.253	-0.016 +/- 0.034	-0.048 +/- 0.277
GLN 90	R GLN 90	0.000 +/- 0.000	-0.398 +/- 0.603	0.026 +/- 0.191	0.501 +/- 0.601	-0.059 +/- 0.095	0.070 +/- 0.309
LIG 91	L LIG 1	0.000 +/- 0.000	-4.301 +/- 2.318	-0.277 +/- 0.460	0.482 +/- 0.390	-0.922 +/- 0.485	-5.018 +/- 2.731
LIG 92	L LIG 2	0.000 +/- 0.000	-4.059 +/- 2.731	-0.318 +/- 0.501	0.462 +/- 0.436	-0.863 +/- 0.552	-4.778 +/- 3.222
LIG 93	L LIG 3	0.000 +/- 0.000	-3.491 +/- 2.442	-0.221 +/- 0.443	0.411 +/- 0.403	-0.741 +/- 0.506	-4.043 +/- 2.846
LIG 94	L LIG 4	0.000 +/- 0.000	-5.510 +/- 2.688	-0.337 +/- 0.500	0.502 +/- 0.403	-1.167 +/- 0.561	-6.512 +/- 3.224
LIG 95	L LIG 5	0.000 +/- 0.000	-5.410 +/- 3.327	-0.310 +/- 0.433	0.471 +/- 0.360	-1.059 +/- 0.590	-6.308 +/- 3.903
LIG 96	L LIG 6	0.000 +/- 0.000	-4.748 +/- 3.024	-0.351 +/- 0.510	0.478 +/- 0.446	-1.004 +/- 0.607	-5.625 +/- 3.615
LIG 97	L LIG 7	0.000 +/- 0.000	-4.003 +/- 2.578	-0.209 +/- 0.430	0.469 +/- 0.397	-0.838 +/- 0.536	-4.580 +/- 2.959
LIG 98	L LIG 8	0.000 +/- 0.000	-3.661 +/- 2.102	-0.236 +/- 0.430	0.429 +/- 0.367	-0.784 +/- 0.428	-4.251 +/- 2.438
LIG 99	L LIG 9	0.000 +/- 0.000	-3.742 +/- 2.368	-0.285 +/- 0.460	0.466 +/- 0.402	-0.783 +/- 0.482	-4.344 +/- 2.764
LIG 100	L LIG 10	0.000 +/- 0.000	-3.720 +/- 2.327	-0.274 +/- 0.445	0.455 +/- 0.393	-0.780 +/- 0.459	-4.319 +/- 2.676

Table S5: Average hydrogen distances for MO-Hex complex

H Acceptor	H Donor	Distance (Å)	H Acceptor	H Donor	Distance (Å)
LIG_96@O1	ARG_47@HH12	2.7316	LIG_92@O1	GLN_90@HE22	2.8757
LIG_96@O1	ARG_6@HH22	2.7721	LIG_92@O	GLN_86@HE21	2.8828
LIG_100@O1	GLN_32@HE22	2.8003	LIG_96@O	GLN_73@HE21	2.885
LIG_99@N2	ARG_79@HH21	2.8006	LIG_98@O1	ARG_51@HH11	2.8863
LIG_95@O1	ARG_62@HE	2.8123	LIG_97@N2	GLN_5@HE21	2.8864
LIG_91@O1	SER_15@HG	2.8208	LIG_93@O	GLN_28@HE22	2.8932
LIG_99@O1	ARG_77@HH21	2.8226	LIG_96@O	HIS_70@HE2	2.8933
LIG_94@O1	ARG_69@HH21	2.8409	LIG_96@O1	THR_74@HG1	2.8961
LIG_96@O1	GLN_33@HE21	2.8452	LIG_99@O	PRO_1@H2	2.8976
LIG_97@O1	TRP_88@HE1	2.8493	LIG_97@O1	ASN_57@HD22	2.8995
LIG_99@O	ARG_87@HH21	2.85	LIG_93@O1	GLN_66@HE21	2.9002
LIG_100@O	ARG_24@HH12	2.851	LIG_95@O1	MET_61@H	2.9015
LIG_92@O1	ARG_83@HH21	2.8617	LIG_92@O1	GLN_34@HE22	2.9018
LIG_97@O1	ARG_12@HH11	2.8619	LIG_100@O	SER_50@HG	2.9039
LIG_95@O1	TYR_46@HH	2.8631	LIG_99@O1	LEU_4@H	2.9056
LIG_95@O1	GLN_59@HE21	2.864	LIG_97@O1	ARG_9@HH12	2.913
LIG_98@O1	GLN_36@HE22	2.8646	LIG_96@O1	GLN_82@HE21	2.917
LIG_99@O1	GLN_76@H	2.8686	LIG_95@O	GLN_31@HE21	2.931
LIG_93@O	GLN_25@HE21	2.8688	LIG_95@O1	CYS_20@H	2.9473
LIG_95@O	GLN_40@HE22	2.869			

Table S6: Average hydrogen distances for MO-Ind complex

H Acceptor	H Donor	Distance (Å)	H Acceptor	H Donor	Distance (Å)
LIG_99@O7	TYR_46@HH	2.6497	MET_61@O	LIG_95@H9	2.5467
LIG_96@O8	ARG_79@HH21	2.6657	GLN_73@O	LIG_96@H10	2.5538
LIG_99@O7	ARG_9@HH21	2.6802	PHE_65@OXT	LIG_94@H10	2.6164
LIG_96@O1	ARG_77@HH22	2.6983	GLN_90@OXT	LIG_97@H9	2.6324
LIG_95@O7	GLN_66@HE21	2.7187	ASN_13@OD1	LIG_92@H9	2.6611
LIG_96@O5	ARG_67@HH21	2.7221	GLN_33@OE1	LIG_97@H10	2.6625
LIG_92@O7	SER_15@HG	2.7279	GLN_40@OE1	LIG_97@H9	2.6627
LIG_94@O7	ARG_62@HH22	2.7672	GLN_75@OE1	LIG_92@H9	2.6687
LIG_92@O7	ASN_13@HD21	2.7686	GLN_32@OE1	LIG_97@H9	2.6697
LIG_92@O5	GLN_59@HE21	2.7702	TRP_88@O	LIG_97@H9	2.6737
LIG_98@O8	ARG_69@HH22	2.7861	GLN_41@OE1	LIG_97@H10	2.6777
LIG_97@O5	GLN_31@HE22	2.792	GLN_36@OE1	LIG_97@H10	2.6792
LIG_98@O8	ARG_12@HH21	2.7971	GLN_76@OE1	LIG_96@H10	2.6803
LIG_97@O5	GLN_34@HE21	2.8015	PRO_16@O	LIG_92@H9	2.683
LIG_99@O5	ARG_47@HH12	2.803	GLN_59@OE1	LIG_95@H9	2.6878
LIG_92@O8	GLN_5@HE21	2.8068	PHE_17@O	LIG_95@H10	2.6889
LIG_97@O6	SER_29@HG	2.8069	GLN_34@OE1	LIG_97@H10	2.6961
LIG_97@O5	ARG_83@HH22	2.807	GLY_35@O	LIG_97@H9	2.6974

LIG_91@O7	GLN_28@HE21	2.8082	GLN_31@OE1	LIG_99@H10	2.7128
LIG_100@O6	GLN_75@HE21	2.8099	CYS_56@O	LIG_95@H10	2.714
LIG_97@O7	ARG_51@HH21	2.8104	VAL_37@O	LIG_91@H9	2.7164
LIG_91@O7	ARG_24@HH12	2.8138	SER_89@O	LIG_97@H9	2.7168
LIG_97@O8	ARG_87@HH22	2.8149	ASN_57@O	LIG_95@H9	2.7231
LIG_98@O6	HIS_70@HE2	2.8154	GLN_25@OE1	LIG_99@H10	2.7239
LIG_93@O5	PRO_1@H2	2.8189	THR_74@O	LIG_96@H10	2.7246
LIG_100@O5	ARG_6@HH22	2.8306	GLN_28@OE1	LIG_98@H10	2.7257
LIG_97@O6	GLN_86@HE21	2.8324	ALA_54@O	LIG_95@H10	2.7322
LIG_92@O8	THR_74@HG1	2.8328	HIE_44@ND1	LIG_99@H9	2.7392
LIG_95@O5	ARG_19@HH12	2.8338	ARG_62@O	LIG_94@H9	2.7471
LIG_99@O8	ASN_57@HD22	2.8374	GLN_66@OE1	LIG_98@H9	2.77
LIG_97@O7	GLN_36@HE22	2.849	GLN_71@OE1	LIG_92@H10	2.7824
LIG_97@O8	GLN_33@HE22	2.8491	HIE_70@ND1	LIG_96@H9	2.8109
LIG_92@O6	GLN_76@HE21	2.8517	ARG_12@O	LIG_92@H10	2.827
LIG_91@O7	GLN_32@HE21	2.8527	LEU_58@O	LIG_95@H8	2.8483
LIG_97@O7	GLN_41@HE22	2.8531	PRO_64@O	LIG_94@H10	2.8503
LIG_96@O6	GLN_73@HE22	2.8531	ARG_87@NH1	LIG_97@H1	2.8688
LIG_93@O5	GLN_40@HE22	2.8541	ARG_9@NH2	LIG_92@H8	2.9034
LIG_97@O8	GLN_90@HE21	2.8545	ARG_47@NH2	LIG_97@H1	2.9169
LIG_92@O6	GLN_71@HE21	2.855	ARG_67@O	LIG_92@H1	2.9217
LIG_95@O6	HIE_44@HE2	2.8573	ARG_77@NH1	LIG_100@H8	2.9273
LIG_92@O6	GLN_10@HE22	2.8579	PRO_39@O	LIG_93@H8	2.9277
LIG_99@O7	GLN_25@HE22	2.8594			
LIG_93@O7	GLY_35@H	2.8686			
LIG_97@O8	TRP_88@HE1	2.8715			
LIG_97@O6	GLN_82@HE21	2.8726			
LIG_94@O5	MET_61@H	2.8758			
LIG_97@O7	GLY_38@H	2.8836			
LIG_95@O8	CYS_68@H	2.8855			
LIG_92@O8	PHE_17@H	2.8861			
LIG_97@O7	VAL_37@H	2.9055			

Table S7: Average hydrogen distances for MO-BR9 complex

H Acceptor	H Donor	Distance (Å)	H Acceptor	H Donor	Distance (Å)
CYS_63@O	LIG_95@H	2.7615	LIG_92@N	ARG_47@HH12	2.7635
GLN_32@OE1	LIG_94@H1	2.7816	LIG_98@N	GLN_31@HE22	2.8144
TYR_46@OH	LIG_93@H3	2.7975	LIG_95@N2	TYR_46@HH	2.8255
ARG_62@O	LIG_92@H3	2.812	LIG_96@N1	ARG_87@HH12	2.8261
GLN_90@O	LIG_97@H	2.8138	LIG_100@N2	ARG_24@HH11	2.8294
GLN_40@NE2	LIG_91@H	2.8202	LIG_99@N	ARG_62@HE	2.836
GLN_59@OE1	LIG_99@H2	2.8309	LIG_94@N	GLN_36@HE22	2.848
PHE_65@O	LIG_92@H	2.833	LIG_96@N2	ARG_51@HH21	2.849

GLN_31@OE1	LIG_98@H1	2.8334	LIG_93@N2	GLN_32@HE22	2.8754
GLN_36@O	LIG_91@H1	2.8347	LIG_99@N2	GLN_59@HE21	2.877
ALA_54@O	LIG_96@H1	2.8436	LIG_91@N2	GLN_66@HE22	2.8795
ARG_47@O	LIG_99@H2	2.8464	LIG_93@N1	GLN_40@HE21	2.891
GLY_43@O	LIG_100@H	2.8531	LIG_96@N1	ASN_57@HD21	2.8924
VAL_84@O	LIG_96@H2	2.8535	LIG_99@N1	TRP_88@HE1	2.8978
GLN_28@OE1	LIG_92@H3	2.871	LIG_93@N	ARG_69@HH12	2.9019
LEU_4@O	LIG_99@H2	2.8748	LIG_97@N1	THR_3@HG1	2.9028
ASN_57@OD1	LIG_99@H3	2.8753	LIG_97@N1	ARG_83@HH11	2.9043
ILE_55@O	LIG_99@H2	2.8754	LIG_92@N	GLY_43@H	2.9092
PRO_39@O	LIG_95@H3	2.8789	LIG_95@N1	HIE_44@HE2	2.9185
PRO_21@O	LIG_94@H4	2.8805	LIG_93@N	SER_29@HG	2.9215
VAL_37@O	LIG_95@H2	2.8829	LIG_94@N	GLN_25@HE22	2.9333
VAL_42@O	LIG_94@H1	2.8895	LIG_100@N	GLN_28@HE22	2.934
PHE_17@O	LIG_99@H	2.8898	LIG_92@N1	SER_50@HG	2.9435
ARG_24@O	LIG_93@H	2.8907	LIG_97@N	GLN_90@HE21	2.9439
MET_61@O	LIG_99@H2	2.8924	LIG_99@N2	CYS_63@H	2.9489
TRP_88@O	LIG_99@H3	2.8932	LIG_99@N2	MET_61@H	2.9501
GLN_25@OE1	LIG_93@H1	2.9032	LIG_96@N	GLN_5@HE21	2.9517
HIS_44@ND1	LIG_99@H	2.9055	LIG_93@N	ARG_77@HH21	2.9534
ILE_52@O	LIG_97@H1	2.9066	LIG_100@N2	VAL_37@H	2.971
PRO_16@O	LIG_99@H1	2.9073			
GLN_5@OE1	LIG_99@H2	2.9087			
GLY_38@O	LIG_94@H	2.9105			
SER_50@O	LIG_99@H3	2.9114			
PRO_64@O	LIG_92@H2	2.913			
SER_29@OG	LIG_93@H1	2.9135			
VAL_27@O	LIG_94@H	2.9179			
GLY_35@O	LIG_94@H3	2.9212			
THR_3@OG1	LIG_97@H3	2.9433			
GLN_66@NE2	LIG_95@H2	2.9436			
PRO_1@O	LIG_96@H3	2.9694			
GLN_41@OE1	LIG_91@H1	2.9913			