

Appendix 1. List of torsion angles for fMLP-OMe:

	for Met					Leu							Phe							OMe		
	E	θ	φ	ψ	ω	X1	X2	X3	X4	φ	ψ	ω	X1	X2	X3	X4	φ	ψ	ω	X1	X2	θ
1	-4,22	179,6	-157,0	131,5	177,1	179,6	171,6	173,3	-60,9	-79,3	88,5	177,5	-179,4	62,8	171,3	-61,0	-71,3	145,6	-176,5	-63,2	-72,1	178,9
2	-3,89	-176,6	-71,6	-22,0	175,0	-68,7	-179,3	-179,9	60,1	-63,1	-36,5	-177,4	176,9	62,2	52,5	58,2	-104,9	17,1	-172,1	-52,5	-77,0	177,2
3	-5,06	-179,2	-76,9	-44,8	-177,3	-67,4	-179,4	-179,9	60,1	-124,8	29,8	-179,3	-58,1	165,6	-60,2	-53,7	-161,4	-13,1	178,8	52,2	85,1	-178,9
4	-4,09	-177,1	-67,3	-33,0	179,5	-70,1	-179,8	-179,7	-59,8	-108,9	32,4	-176,6	-52,9	172,0	-59,0	-171,6	-148,0	-0,3	-172,8	-57,9	-78,9	177,5
5	-4,02	-179,4	-67,6	-44,0	-179,4	-174,2	175,6	179,1	60,0	-84,0	-33,9	179,7	-55,5	175,1	-58,5	-49,7	-145,6	128,7	-173,1	-58,8	-76,7	177,5
6	-3,23	-179,6	-69,4	-41,6	177,5	-172,6	175,2	179,8	179,9	-72,5	-41,0	178,4	178,4	63,5	52,6	59,4	-156,4	139,6	-175,0	178,5	-100,3	178,3
7	-5,65	-178,8	-81,3	77,4	-176,0	-67,8	-177,0	178,5	59,8	-86,6	65,7	174,7	-56,6	174,0	-178,6	70,4	-163,1	-14,5	-177,9	53,8	-97,5	179,3
8	-3,22	-178,7	-78,7	78,7	176,2	-67,5	-177,6	179,6	60,0	-77,5	-23,3	178,5	-58,5	172,2	61,1	-49,5	-143,2	-11,7	175,6	-56,8	101,0	-178,6
9	-3,59	-179,7	-69,6	133,1	179,6	-169,5	-178,4	175,7	179,6	-96,4	125,2	178,0	-53,0	175,5	61,5	-50,6	-159,0	-16,0	-175,5	57,1	87,7	178,4
10	-3,57	-178,6	-77,8	82,8	177,1	-67,1	-178,3	-179,9	60,1	-72,0	94,4	178,0	178,5	61,4	51,6	178,9	-73,8	-24,2	172,3	-59,1	112,3	-177,2
11	-3,02	-179,2	-73,5	-38,2	176,5	-68,5	-179,3	-179,9	-179,9	-72,7	-41,0	178,3	178,3	63,4	52,6	179,3	-156,6	139,3	-175,0	178,4	79,7	178,1
12	-3,94	-179,2	-67,2	-42,4	-179,8	-174,0	175,2	179,1	59,9	-81,7	-36,6	175,7	-56,4	174,6	61,6	-49,4	-158,7	151,8	-173,3	52,5	86,2	177,6
13	-3,04	-179,1	-68,1	-43,2	-179,5	-174,0	175,5	179,0	-180,0	-83,0	-31,7	177,5	-54,9	175,6	-178,4	-49,8	-155,9	136,2	-174,9	178,3	-100,5	178,2
14	-3,64	-179,6	-72,0	133,7	177,8	-170,3	-179,3	175,7	179,7	-89,5	121,1	174,4	178,9	63,8	-67,6	-60,6	-156,6	-15,6	-176,5	57,5	-93,2	178,9
15	-3,52	-179,0	-73,0	-38,4	178,8	-68,5	-179,4	-179,9	-179,9	-82,9	-36,2	179,6	-56,4	173,8	-178,7	-169,8	-145,8	130,1	-173,4	-58,9	-76,7	177,6
16	-3,31	-180,0	-69,0	116,0	180,0	178,0	62,0	-172,0	-178,0	-80,0	92,0	180,0	179,0	61,0	-68,0	-61,0	-73,0	-25,0	180,0	-62,0	107,0	-180,0
17	-4,28	-179,8	-75,2	95,5	172,7	-173,1	178,9	175,9	-58,6	-76,4	-35,8	176,3	-59,1	171,7	61,2	-169,6	-160,4	-17,1	-172,3	53,5	-94,2	177,0
18	-4,12	-179,8	-71,0	-43,7	-179,5	-172,9	175,4	179,7	-179,9	-79,6	-38,5	175,7	-176,7	65,4	171,5	58,4	-140,5	129,5	-177,7	-63,6	-63,6	179,4
19	-2,97	-179,3	-80,1	160,0	177,6	-65,8	-179,3	-179,7	-59,9	-75,6	84,9	178,9	-178,0	63,9	51,3	-60,7	-76,5	145,3	-176,5	-59,2	-66,8	178,7
20	-3,92	180,0	-75,0	132,0	180,0	-66,0	-174,0	-80,0	-175,0	-104,0	38,0	180,0	-51,0	174,0	-58,0	68,0	-162,0	-18,0	180,0	52,0	86,0	180,0
21	-4,11	-180,0	-160,0	168,0	180,0	59,0	179,0	-179,0	177,0	-69,0	99,0	180,0	177,0	61,0	51,0	178,0	-78,0	-22,0	180,0	-56,0	-68,0	-180,0
22	-3,09	-179,7	-70,0	-39,3	179,9	-172,8	175,0	179,5	60,1	-149,5	129,6	-177,8	-179,8	67,5	-66,2	180,0	-160,0	-15,6	-176,0	56,8	89,9	178,8
23	-3,51	-178,9	-73,0	-36,4	178,1	-68,5	-179,4	-179,9	179,9	-80,8	-38,0	175,8	-57,5	172,9	-178,6	-49,7	-158,8	151,3	-173,1	52,7	86,4	177,5
24	-2,93	-179,3	-73,7	131,0	-178,1	-68,7	-179,1	-179,8	-59,9	-92,2	152,7	-179,6	-53,1	175,8	-58,5	69,7	-145,8	156,9	180,0	-61,2	-75,4	180,0
25	-2,94	-179,3	-73,3	131,9	-178,0	-68,9	-179,2	-179,7	60,1	-92,5	153,0	-179,7	-53,1	175,7	-58,5	69,8	-146,4	-21,6	180,0	-61,3	104,5	-180,0

Appendix 1. (Continued from the previous page)

		for Met				Leu							Phe							OMe		
	E	θ	φ	ψ	ω	X1	X2	X3	X4	φ	ψ	ω	X1	X2	X3	X4	φ	ψ	ω	X1	X2	θ
26	-3,69	-179,4	-77,7	83,2	177,6	-169,2	179,1	-178,7	61,4	-80,1	-28,6	-178,4	-58,7	172,2	-58,7	-49,5	-145,2	166,6	176,7	-57,5	-75,8	-178,6
27	-4,14	-178,4	-80,3	74,8	-179,1	-68,1	-73,0	178,5	-60,2	-83,7	72,1	-178,6	-56,8	173,6	-178,6	-169,6	-145,0	-24,1	179,8	-56,0	-73,9	-180,0
28	-4,50	-177,7	-60,7	-41,3	179,9	-174,7	172,9	81,3	-63,3	-109,8	37,5	-177,1	-53,9	170,9	-59,2	68,2	-148,3	-0,6	-173,3	-58,5	101,5	177,6
29	-3,74	-178,8	-67,7	-38,2	-176,6	-173,4	174,8	179,4	-60,1	-80,1	-40,2	177,7	-56,8	174,3	61,6	70,6	-161,0	-21,2	-178,5	53,0	84,8	178,9
30	-3,33	180,0	-160,0	-54,0	180,0	-176,0	176,0	177,0	-60,0	-93,0	133,0	-180,0	-54,0	172,0	-58,0	-171,0	-145,0	157,0	180,0	-58,0	-75,0	180,0
31	-3,19	-178,2	-78,7	77,4	176,8	-67,1	-178,7	179,9	60,0	-69,3	-33,8	176,6	179,7	64,1	-67,7	-60,9	-153,0	165,1	179,2	56,8	-93,0	-179,8
32	-3,58	-179,1	-77,1	79,3	178,7	-169,6	-179,9	177,0	-60,4	-85,2	67,9	-178,1	-170,8	72,4	54,4	-179,5	-150,8	149,4	-179,9	-62,3	-79,3	180,0
33	-3,68	-179,5	-161,9	-55,2	-178,2	-177,2	175,9	177,9	-60,3	-84,7	72,8	-176,9	-56,5	172,9	-178,9	-170,5	-80,6	-29,9	177,9	-55,3	116,8	-179,4
34	-3,97	-179,2	-75,9	83,8	173,7	-170,3	-179,4	176,9	62,3	-73,1	-38,0	173,8	-176,0	67,4	52,3	179,2	-142,7	-33,0	-168,9	-64,0	114,0	176,4
35	-3,09	179,5	-156,2	139,1	178,2	-169,9	179,0	175,8	59,8	-95,7	123,4	177,7	-54,2	174,2	-178,7	-50,4	-158,7	-16,4	-175,6	57,0	-92,3	178,5
36	-2,99	-178,9	-76,2	-30,4	-177,4	-67,5	-179,2	-179,9	60,1	-82,8	-40,8	-177,8	-56,2	174,0	-58,8	-49,8	-147,3	-36,1	-178,6	-59,7	-74,8	-180,0
37	-3,50	-178,6	-75,5	-28,9	-178,5	-67,6	-179,2	-179,8	60,1	-80,1	-41,1	177,9	-57,5	172,9	61,3	-169,8	-160,8	-20,9	-179,8	52,9	84,6	179,6
38	-2,87	180,0	-71,0	139,0	180,0	-171,0	174,0	84,0	-62,0	-69,0	99,0	180,0	177,0	61,0	171,0	178,0	-79,0	-20,0	180,0	-54,0	-66,0	180,0
39	-3,78	179,5	-156,3	133,1	-175,9	-170,4	173,8	175,7	57,6	-71,6	-52,2	-177,5	175,7	60,4	-67,9	57,1	-93,5	26,5	173,3	-54,6	-71,1	-178,7
40	-3,57	-179,8	-69,5	126,6	-177,6	-175,0	66,3	-175,4	60,5	-91,1	157,3	-179,9	-53,2	175,9	61,7	-50,3	-144,1	-23,9	179,8	-61,0	-76,4	-179,9
41	-4,24	179,6	-154,4	93,1	179,9	-174,8	168,5	178,4	175,4	-109,2	44,5	-179,9	-53,7	172,1	-179,0	68,8	-160,1	167,1	177,8	52,7	-95,1	-179,2
42	-2,98	-176,6	-66,4	-32,0	179,7	-70,4	-179,8	-179,8	180,0	-110,0	33,9	-177,5	-53,1	171,7	60,9	68,3	-147,3	170,3	179,6	-59,3	-78,9	-179,9
43	-3,54	-176,0	-88,1	-9,9	-174,3	-65,2	-72,0	178,8	180,0	-100,3	11,5	179,1	-51,9	174,6	-178,6	-171,1	-158,8	-3,5	-173,9	53,7	-92,9	178,1
44	-2,86	-178,8	-66,3	-33,5	179,3	-170,9	67,6	-176,5	-179,6	-80,1	75,5	-179,2	-57,2	173,9	-178,7	-169,4	-70,0	140,4	-176,1	-61,9	-71,2	178,8
45	-3,08	-178,3	-79,7	76,6	179,3	-66,6	-178,1	179,7	59,8	-90,0	155,0	179,9	-54,6	174,6	61,4	-170,1	-145,5	-22,3	179,8	-59,9	106,1	-180,0
46	-3,16	179,5	-156,6	144,7	174,8	-171,0	172,5	81,9	55,9	-70,1	95,8	-179,1	178,2	61,2	51,6	-61,1	-77,4	-23,2	174,0	-56,3	-67,2	-177,9
47	-3,42	-179,8	-71,0	121,6	-179,4	-171,4	179,0	86,7	-59,8	-81,1	-42,4	177,1	-56,3	174,6	-178,4	70,5	-159,8	-18,0	-175,2	53,3	-94,8	179,2
48	-3,06	180,0	-160,0	172,0	180,0	60,0	178,0	-177,0	-62,0	-72,0	88,0	-180,0	-60,0	169,0	-59,0	70,0	-67,0	141,0	-180,0	-59,0	-70,0	-180,0
49	-3,31	-179,0	-63,0	-39,0	-177,5	-174,0	175,4	82,4	-62,3	-83,8	74,9	179,5	-55,5	175,4	61,6	-49,8	-67,8	139,3	-175,9	-64,2	106,8	178,7
50	-3,21	-179,8	-160,5	161,2	178,8	62,7	-173,0	-176,4	-59,4	-81,8	-41,7	-178,5	-57,3	172,9	-58,9	-49,8	-147,6	158,8	172,2	-59,8	104,3	-177,3