

Appendice 2. List of torsion angles for fML^SP-OMe:

	for	Met				Thio-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	-3,23	-179,8	-70,2	121,8	178,8	-178,0	170,7	173,8	59,4	-77,5	90,5	176,4	179,8	62,7	51,6	179,2	-71,7	148,2	-175,7	-63,7	-73,7	178,4
2	-2,87	-176,4	-71,4	-21,1	175,3	-68,7	-179,4	-179,9	60,1	-63,6	-34,6	-177,9	177,8	63,0	52,6	58,2	-107,5	16,8	-173,1	-52,7	-78,1	177,7
3	-4,65	-178,7	-81,4	77,2	-175,8	-67,7	-177,0	178,5	59,7	-87,0	64,9	175,0	-56,4	173,9	-178,7	-49,7	-162,0	-14,8	-177,7	55,0	82,7	179,2
4	-2,87	-176,8	-67,2	-33,1	-179,9	-70,2	-179,7	-179,9	-60,0	-108,9	30,9	-176,7	-52,8	172,2	-59,0	-171,7	-145,3	-2,8	-173,6	-58,5	-80,0	177,6
5	-2,04	-179,6	-68,9	-41,8	177,8	-172,8	175,2	179,7	180,0	-73,0	-41,1	178,7	179,0	64,7	52,8	59,5	-155,3	139,2	-174,9	178,4	-100,2	178,1
6	-2,69	-179,4	-67,1	-44,1	-179,4	-174,3	175,5	178,9	-60,1	-84,3	-35,5	-180,0	-55,5	175,1	61,5	70,2	-141,7	127,4	-173,6	-57,9	102,5	177,8
7	-2,07	-180,0	-70,0	133,0	-180,0	-171,0	177,0	176,0	179,0	-103,0	132,0	-180,0	-52,0	174,0	61,0	-50,0	-160,0	-16,0	-180,0	57,0	88,0	-180,0
8	-2,84	-179,2	-67,0	-42,5	-179,8	-174,1	175,2	179,2	59,9	-81,9	-37,1	175,8	-56,4	174,4	61,6	-49,5	-157,1	151,2	-173,3	53,5	86,6	177,6
9	-1,61	-178,3	-79,4	75,7	178,1	-66,9	-178,6	-180,0	60,0	-79,3	-27,0	-179,9	-58,2	172,5	-58,8	70,5	-139,2	158,5	-178,8	-56,3	-78,6	179,6
10	-1,98	-178,6	-78,9	78,0	176,5	-67,4	-177,6	179,5	60,0	-77,1	-24,4	178,9	-58,7	172,1	61,2	-49,5	-138,8	-13,6	175,5	-56,3	100,0	-178,5
11	-2,32	-179,7	-71,5	133,1	179,2	-170,1	-179,0	175,9	59,6	-90,6	115,7	174,5	178,5	62,7	172,0	59,0	-153,8	-16,4	-175,9	60,0	-91,8	178,5
12	-2,19	-179,0	-72,6	-38,8	178,8	-68,7	-179,4	-179,9	-179,9	-83,2	-37,2	-179,8	-56,5	173,6	-178,7	-169,7	-141,9	127,7	-174,0	-57,9	-77,5	177,9
13	-2,13	-179,8	-70,5	113,2	177,4	-179,5	63,3	-174,4	-179,2	-77,2	91,4	176,2	179,0	62,0	-68,4	-61,0	-72,0	-23,6	172,7	-62,9	107,3	-177,4
14	-3,62	-178,7	-76,4	80,4	175,0	-70,7	-74,6	176,9	179,8	-105,1	35,0	-178,0	-52,9	172,8	-58,9	-171,3	-160,2	-16,6	-176,5	53,0	-94,6	178,7
15	-1,62	-179,7	-71,1	-39,5	-179,4	-172,8	175,1	179,6	60,1	-148,9	123,0	-178,1	178,8	65,3	-66,9	179,6	-157,1	-16,4	-175,4	59,4	91,5	178,5
16	-2,67	-179,8	-70,5	-43,7	-179,3	-172,9	175,4	179,7	60,0	-80,4	-40,0	176,4	-178,2	63,7	51,2	177,4	-135,3	126,4	-178,4	-62,8	-63,8	179,6
17	-2,02	-178,2	-78,7	77,2	176,9	-67,1	-178,6	180,0	60,1	-69,3	-34,3	176,8	179,6	65,0	-67,2	-60,6	-151,3	165,2	179,2	56,6	-93,1	-179,7
18	-3,27	-177,3	-61,0	-41,1	-179,7	-174,7	172,8	81,3	-63,3	-110,3	35,8	-177,1	-54,1	170,9	-59,1	68,2	-145,5	-2,8	-174,2	-59,0	-79,5	177,8
19	-2,59	-178,8	-67,6	-38,1	-176,6	-173,3	174,9	179,3	-60,1	-80,2	-40,7	177,9	-56,9	174,2	61,6	70,7	-159,7	-21,7	-178,4	54,1	85,1	178,9
20	-2,52	-176,0	-88,1	-8,8	-174,8	-65,2	-72,0	178,8	179,8	-98,0	8,1	179,5	-52,1	174,7	-178,7	-171,0	-155,9	-3,8	-173,9	54,1	-92,6	178,2
21	-2,42	-176,1	-85,2	-7,7	-178,5	-65,3	-178,6	-179,8	60,0	-85,0	-7,2	-178,9	-79,1	65,3	50,2	59,4	-144,3	3,0	-172,2	53,9	88,8	177,5
22	-1,00	-178,6	-78,4	78,2	176,0	-68,8	-73,4	179,1	179,9	-78,5	-25,8	179,3	-58,2	172,5	61,2	-49,5	-139,1	158,5	-178,7	-56,2	100,7	179,6
23	-3,31	-179,3	-76,0	-46,8	-176,2	-170,7	70,8	-178,4	-179,9	-120,8	28,8	-179,3	-56,4	168,3	-179,6	-172,5	-160,9	-7,1	176,9	53,2	85,8	-177,4
24	-2,35	-178,6	-75,5	-28,8	-178,4	-67,7	-179,2	-179,9	60,0	-80,2	-41,4	178,0	-57,6	172,8	61,4	-169,6	-159,5	-21,7	-179,4	54,2	85,2	179,5
25	-1,84	-176,2	-66,5	-31,6	-179,9	-70,3	-179,8	-179,8	180,0	-110,2	31,9	-177,5	-53,1	171,6	60,9	68,2	-144,6	168,6	179,7	-59,9	-80,3	-179,9

Appendice 2. (Continued from the previous page)

		for	Met	Thio-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	-1,65	-177,9	-66,8	-33,1	178,6	-169,2	69,1	-178,4	60,2	-62,8	-36,7	-177,6	177,6	63,8	173,0	-61,3	-103,6	26,4	-171,1	-52,6	-77,0	176,8
27	-1,41	-178,2	-79,0	76,3	178,2	-66,9	-178,7	-179,8	-179,9	-148,5	93,5	-178,8	178,6	62,5	52,0	-60,9	-139,3	155,1	-179,4	-57,0	105,5	179,8
28	-1,73	-178,5	-79,2	77,5	178,9	-66,8	-178,1	179,9	60,0	-89,8	153,6	-179,8	-54,9	174,6	61,4	-170,0	-142,1	-23,2	179,7	-60,4	104,3	-179,9
29	-1,44	-179,7	-70,9	121,8	-177,9	-174,0	67,6	-178,4	-59,7	-81,8	137,2	176,0	-177,4	68,7	-66,0	60,1	-127,0	156,5	-179,3	-59,9	106,8	179,8
30	-1,35	-178,3	-78,9	76,3	178,3	-67,0	-178,7	179,8	179,8	-148,0	93,5	-178,9	178,5	62,5	52,0	179,0	-140,0	-23,5	179,0	-57,0	-74,6	-179,6
31	-2,64	-176,2	-78,1	-12,7	177,1	-66,9	-178,8	-179,9	-180,0	-67,0	-26,1	-177,6	179,7	64,2	-67,5	179,4	-129,3	8,7	-171,7	55,0	87,9	177,1
32	-1,02	-179,2	-76,4	86,9	175,3	-170,4	70,5	-173,7	-179,1	-144,4	85,3	-178,3	-178,5	64,7	51,9	59,4	-140,1	-24,6	179,3	-55,7	106,4	-179,8
33	-1,65	-178,0	-79,3	73,9	179,4	-66,4	-178,7	-179,9	-59,9	-157,1	-54,7	173,1	177,3	62,9	52,5	58,4	-121,4	-31,7	174,6	-57,3	-61,3	-178,2
34	-1,39	-178,9	-79,8	150,6	-175,4	-64,6	-69,7	-179,1	-179,9	-106,1	25,0	179,9	-52,0	173,8	61,2	68,7	-159,5	161,4	178,6	55,9	-91,8	-179,5
35	-1,73	-179,7	-72,7	122,2	-177,0	-171,6	69,7	-174,8	-57,7	-71,9	-49,6	-178,5	176,9	59,7	171,6	56,2	-101,7	99,7	-173,6	-56,5	110,9	177,9
36	-2,56	-178,8	-77,3	77,7	178,4	-168,2	178,9	179,9	60,4	-77,2	-34,2	177,6	-179,4	61,0	-69,4	55,8	-133,0	166,2	176,0	-59,8	-64,5	-178,3
37	-1,97	-178,1	-79,9	73,0	-179,1	-67,9	-73,3	178,9	59,9	-81,6	76,2	179,7	-174,2	68,8	52,7	60,0	-142,9	155,8	-179,8	-59,4	105,1	179,9
38	-1,18	-178,1	-79,9	73,6	178,6	-67,1	-73,0	179,0	59,9	-80,4	-31,6	-179,5	-57,8	172,7	61,2	-49,6	-141,2	-24,5	-179,7	-56,8	-77,7	179,0
39	-1,74	-177,9	-80,6	70,6	-176,8	-66,9	-176,7	83,7	57,9	-82,5	87,1	176,0	-178,3	64,4	-68,4	179,3	-134,4	-24,7	179,7	-54,4	-66,5	-179,9
40	-1,27	-179,7	-69,9	131,3	-177,7	-170,3	69,8	-176,2	60,4	-95,2	119,5	176,8	-52,9	175,5	-58,5	-170,6	-155,8	-16,7	-175,5	58,3	-92,3	178,5
41	-2,45	-179,3	-73,3	-46,8	-178,2	-172,0	69,7	-178,2	60,2	-117,8	24,0	-177,9	-55,3	169,1	-59,6	-52,3	-159,5	153,2	-179,8	53,2	-92,7	179,9
42	-1,87	-178,1	-78,8	73,8	-179,6	-66,6	-178,7	-179,9	60,0	-158,5	-52,5	173,8	179,4	63,6	-68,0	-61,5	-143,9	-20,0	178,9	65,3	90,9	-179,5
43	-0,86	-178,2	-78,7	77,5	177,6	-67,9	-72,4	178,6	59,9	-147,6	91,6	-178,2	179,1	62,9	171,8	59,1	-138,2	154,5	-179,4	-56,2	-72,4	179,8
44	-0,78	-178,4	-78,7	77,6	177,6	-67,9	-72,4	178,7	59,9	-146,7	91,5	-178,3	179,1	62,8	171,8	179,1	-139,0	-23,8	179,0	-56,3	107,4	-179,6
45	-3,15	-178,4	-82,0	75,0	-174,6	-66,8	177,2	82,7	58,3	-89,3	61,7	176,6	-55,7	174,5	-58,6	-49,8	-164,4	164,0	178,1	49,4	-99,0	-179,3
46	-0,45	-179,6	-71,3	-40,9	-179,6	-171,3	69,3	-178,7	-59,9	-148,9	122,7	-178,1	178,7	65,2	-67,1	179,5	-156,9	-16,6	-175,1	59,5	91,7	178,3
47	-1,50	-179,5	-75,3	-40,8	179,8	-68,5	-73,3	179,1	179,9	-79,9	-39,9	176,3	-178,2	63,8	171,3	-62,6	-135,4	126,7	-178,3	-62,7	116,2	179,8
48	-2,10	-178,6	-77,2	81,6	175,7	-68,8	-70,9	-82,4	-56,2	-105,1	34,8	-178,1	-52,9	172,8	61,0	-171,4	-160,3	162,6	178,2	52,0	-94,8	-179,3
49	-1,55	-179,8	-71,0	-44,5	-179,4	-171,6	69,5	-178,7	-179,9	-79,8	-39,7	176,4	-178,3	63,6	51,2	177,3	-135,3	126,3	-178,6	-62,7	-63,8	179,8
50	-1,81	-179,2	-77,2	82,0	176,4	-169,9	71,1	178,5	-59,2	-82,3	-39,4	178,5	-58,1	172,2	-58,8	70,3	-159,0	169,6	173,0	53,1	84,3	-177,7