Strong Solute-Solute Dispersive Interactions in a Protein – Ligand Complex

Richard Malham, Sarah Johnstone, Richard J. Bingham, Elizabeth Barratt, Simon E. V. Phillips

Charles A. Laughton and Steve W. Homans

SUPPORTING INFORMATION

(13) Brünger, A. T.; Adams, P. D.; Clore, G. M.; DeLango, W. L.; Gros, P.; Grosse-Kunstleve, R.W. Jiang, J.-S.; J., K.; Nilges, M.; Pannu, N. S.; Read, R. J.; Rice, L. M.; Simonson, T.; Warren, G. L. *Acta Cryst.* **1998**, *D54*, 905-921.

(15) Bingham, R.; Bodenhausen, G.; Findlay, J. H. B. C.; Hsieh, S.-Y.; Kalverda, A. P.; Kjellberg, A.; Perazzolo, C.; Phillips, S. E. V.; Seshadri, K.; Turnbull, W. B.; Homans, S. W. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 1675-1681.

(17) Case, D. A.; Darden, T. A.; Cheatham III, T. E.; Simmerling, C. L.; Wang, J.; Duke, R. E.; Luo, R.; Merz, K. M.; Wang, B.; Pearlman, D. A.; Crowley, M.; Brozell, S.; Tsui, V.; Gohlke, H.; Mongan, J.; Hornak, V.; Cui, G.; Beroza, P.; Schafmeister, C.; Caldwell, J. W.; Ross, W. S.; Kollman, P. A.; AMBER 8, University of California, San Francisco, 2004.

(19) Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Zakrzewski, V. G.; Montgomery, J. A.; Stratmann, R. E.; Burant, J. C.; Dapprich, S.; Millam, J. M.; Daniels, A. D.; Kudin, K. N.; Strain, M. C.; Farkas, O.; Tomasi, J.; Barone, V.; Cossi, M.; Cammi, R.; Mennucci, B.; Pomelli, C.; Adamo, C.; Clifford, S.; Ochterski, J.; Petersson, G. A.; Ayala, P. Y.; Cui,

Q.; Morokuma, K.; Malick, D. K.; Rabuck, A. D.; Raghavachari, K.; Foresman, J. B.; Cioslowski, J.; Ortiz, J. V.; Stefanov, B. B.; Liu, G.; Liashenko, A.; Piskorz, P.; Komaromi, I.; Gomperts, R.; Martin, R. L.; Fox, D. J.; Keith, T.; Al-Laham, M. A.; Peng, C. Y.; Nanayakkara, A.; Gonzalez, C.; Challacombe, M.; Gill, P. M. W.; Johnson, B. G.; Chen, W.; Wong, M. W.; Andres, J. L.; Head-Gordon, M.; Replogle, E. S.; Pople, J. A. *Gaussian, Inc., Pittsburgh PA* **1998**.

Figure S1. Typical ITC binding curves for the association of (a) pentan-1-ol; (b) hexan-1-ol; (c) heptan-1-ol; (d) octan-1-ol and (e) nonan-1-ol to MUP-I.