

Supporting Information For

Computational Study of the Structure and Electronic Circular
Dichroism Spectroscopy of Blue Copper Proteins

Hainam Do, Robert J. Deeth and Nicholas A. Besley

Full References

(35) Brooks, B. R.; Brooks III, C. L.; Mackerell, A. D.; Nilsson, L. ; Petrella, R. J.; Roux, B.; Won, Y.; G. Archontis, G.; Bartels, C.; Boresch, S.; Caflisch, A.; Caves, L.; Cui, Q.; Dinner, A. R.; Feig, M.; Fischer, S.; Gao, J.; Hodoscek, M.; Im, W.; Kuczera, K.; Lazaridis, T.; Ma, J.; Ovchinnikov, V.; Paci, E.; Pastor, R. W.; Post, C. B.; Pu, J. Z.; Schaefer, M.; Tidor, B.; Venable, R. M.; Woodcock, H. L.; Wu, X.; Yang, W.; York, D. M.; Karplus, M. CHARMM: The Biomolecular Simulation Program. *J. Comp. Chem.*, 2009, 30, 1545-1614.

(39) Shao, Y.; Molnar, L. F.; Jung, Y.; Kussmann, J.; Ochsenfeld, C.; Brown, S. T.; Gilbert, A. T. B.; Slipchenko, L. V.; Levchenko, S. V.; O'Neill, D. P.; DiStasio Jr, R. A.; Lochan, R. C.; Wang, T.; Beran, G. J. O.; Besley, N. A.; Herbert, J. M.; Lin, C. Y.; Voorhis, T. V.; Chien, S.-H.; Sodt, A.; Steele, R. P.; Rassolov, V. A.; Maslen, P. E.; Korambath, P. P.; Adamson, R. D.; Austin, B.; Baker, J.; Byrd, E. F. C.; Dachsel, H.; Doerksen, R. J.; Dreuw, A.; Dunietz, B. D.; Dutoi, A. D.; Furlani, T. R.; Gwaltney, S. R.; Heyden, A.; Hirata, S.; Hsu, C.-P.; Kedziora, G.; Khalliulin, R. Z.; Klunzinger, P.; Lee, A. M.; Lee, M. S.; Liang, W.; Lotan, I.; Nair, N.; Peters, B.; Proynov, E. I.; Pieniazek, P. A.; Rhee, Y. M.; Ritchie, J.; Rosta, E.; Sherrill, C. D.; Simmonett, A. C.; Subotnik, J. E.; Woodcock III, H. L.; Zhang, W.; Bell, A. T.; Chakraborty, A. K.; Chipman, D. M.; Keil, F. J.; Warshel, A.; Hehre, W. J.; Schaefer III, H. F.; Kong, J.; Krylov, A. I.; Gill, P. M. W.; Head-Gordon, M. Advances in Methods and Algorithms in a Modern Quantum Chemistry Program Package. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2006**, 8, 3172-3191.

(44) MOLPRO, version 2006.1, a package of ab initio programs, Werner, H.-J. P., Knowles, P.J., Lindh, R., Manby, F.R., Schütz, M., Celani, P., Korona, T., Rauhut, G., Amos, R.D., Bernhardsson, A., Berning, A., Cooper, D.L., Deegan, M.J.O., Dobbyn, A.J., Eckert, F., Hampel, C., Hetzer, G., Lloyd, A.W., McNicholas, S.J., Meyer, W., Mura, M.E., Nicklass, A., Palmieri, P., Pitzer, R., Schumann, U., Stoll, H., Stone, A.J., Tarroni, R. and Thorsteinsson. T.