

Supporting Information

Table 1 : Analysis of 60 2ns Molecular Dynamic simulations from AMD conformations.

N	Total energy (kcal.mol ⁻¹) (includes solvent) ^a	Average ΔS ² /site	Average rmsd compared to 1igg over 2ns MD (Å)	Average rmsd compared to mean over 2ns MD (Å)
1	-39938.1	0.046	0.46	0.48
2	-39926.5	0.045	0.56	0.52
3	-39937.7	0.042	0.58	0.50
4	-39934.4	0.039	0.44	0.46
5	-39921.4	0.049	1.24	0.64
6	-39930.3	0.045	0.76	0.55
7	-39931.8	0.043	0.67	0.49
8	-39930.4	0.045	0.64	0.53
9	-39932.9	0.045	0.37	0.49
10	-39923.4	0.045	0.53	0.48
11	-39933.3	0.048	0.63	0.49
12	-39932.6	0.047	0.59	0.45
13	-39932.7	0.041	0.51	0.48
14	-39928.7	0.040	0.45	0.51
15	-39927.8	0.037	0.68	0.49
16	-39925.4	0.050	0.97	0.57
17	-39926.5	0.046	0.46	0.47
18	-39931.1	0.046	0.73	0.57
19	-39928.4	0.045	0.53	0.46
20	-39932.4	0.047	0.51	0.46
21	-39933.9	0.046	0.77	0.69
22	-39926.5	0.042	0.42	0.53
23	-39927.7	0.042	0.44	0.59
24	-39933.3	0.046	0.53	0.50
25	-39929.7	0.049	1.07	0.67
26	-39932.4	0.041	0.82	0.47
27	-39931.1	0.040	0.39	0.48
28	-39932.1	0.048	0.68	0.50
29	-39929.6	0.043	0.59	0.47
30	-39929.5	0.046	0.63	0.50
31	-39928.8	0.046	0.49	0.54
32	-39932.4	0.047	0.52	0.68
33	-39929.6	0.049	0.66	0.51
34	-39934.3	0.045	0.71	0.43
35	-39928.4	0.043	0.52	0.47
36	-39932.1	0.045	0.58	0.49
37	-39927.1	0.041	0.63	0.59
38	-39929.2	0.048	0.69	0.48
39	-39928.9	0.040	0.47	0.54
40	-39929.5	0.048	0.58	0.52
41	-39929.7	0.048	0.69	0.49
42	-39930.2	0.042	0.62	0.49
43	-39931.6	0.044	0.59	0.57
44	-39931.0	0.042	0.47	0.48
45	-39933.3	0.041	0.88	0.55
46	-39932.3	0.037	0.64	0.58
47	-39932.5	0.039	0.55	0.48
48	-39931.0	0.046	0.58	0.50
49	-39930.2	0.046	0.57	0.54
50	-39932.0	0.046	0.57	0.59
51	-39932.9	0.046	0.52	0.52
52	-39929.6	0.043	0.67	0.54
53	-39925.4	0.048	0.51	0.48
54	-39934.7	0.043	0.72	0.57
55	-39926.7	0.044	0.70	0.59
56	-39922.8	0.049	1.17	0.67
57	-39932.3	0.041	0.53	0.48
58	-39932.1	0.043	0.49	0.55
59	-39928.0	0.041	0.68	0.60
60	-39933.5	0.045	0.54	0.47

^a - standard deviation for the total energy across each trajectory is about 56-59 kcal/mol

Reference 60 in full :

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. **2004**, AMBER 8, University of California, San Francisco