

**Table 2. Compound secondary chemical shifts of the backbone amides caused by ATP and AMP**

<b>Residue</b>	<b>ATP</b>	<b>AMP</b>	<b>Residue</b>	<b>ATP</b>	<b>AMP</b>	<b>Residue</b>	<b>ATP</b>	<b>AMP</b>
<b>1032</b>	n.d.	n.d.	<b>1071</b>	n.d.	n.d.	<b>1110</b>	0.0003	0.0001
<b>1033</b>	n.d.	n.d.	<b>1072</b>	0.0030	0.0078	<b>1111</b>	0.0045	0.0007
<b>1034</b>	n.d.	n.d.	<b>1073</b>	0.0012	0.0027	<b>1112</b>	0.0001	0.0008
<b>1035</b>	0.0006	0.0001	<b>1074</b>	0.0004	0.0009	<b>1113</b>	0.0080	0.0035
<b>1036</b>	0.0029	0.0023	<b>1075</b>	0.0041	0.0007	<b>1114</b>	0.0023	0.0004
<b>1037</b>	n.d.	n.d.	<b>1076</b>	0.0046	0.0003	<b>1115</b>	0.0004	0.0019
<b>1038</b>	0.0007	0.0002	<b>1077</b>	0.0018	0.0037	<b>1116</b>	0.0031	0.0051
<b>1039</b>	0.0172	0.0089	<b>1078</b>	0.0122	0.0069	<b>1117</b>	0.0031	0.0002
<b>1040</b>	0.0031	0.0027	<b>1079</b>	0.0069	0.0052	<b>1118</b>	0.0039	0.0002
<b>1041</b>	0.0043	0.0019	<b>1080</b>	0.0013	0.0024	<b>1119</b>	n.d.	n.d.
<b>1042</b>	0.0007	0.0013	<b>1081</b>	0.0094	0.0083	<b>1120</b>	0.0000	0.0002
<b>1043</b>	0.0001	0.0004	<b>1082</b>	0.0013	0.0016	<b>1121</b>	0.0022	0.0005
<b>1044</b>	0.0029	0.0016	<b>1083</b>	0.0006	0.0001	<b>1122</b>	0.0036	0.0001
<b>1045</b>	0.0019	0.0013	<b>1084</b>	0.0055	0.0010	<b>1123</b>	n.d.	n.d.
<b>1046</b>	0.0009	0.0018	<b>1085</b>	0.0029	0.0017	<b>1124</b>	0.0010	0.0001
<b>1047</b>	0.0007	0.0011	<b>1086</b>	0.0047	0.0010	<b>1125</b>	0.0024	0.0001
<b>1048</b>	0.0022	0.0030	<b>1087</b>	0.0005	0.0009	<b>1126</b>	0.0030	0.0001
<b>1049</b>	0.0005	0.0026	<b>1088</b>	0.0027	0.0001	<b>1127</b>	0.0056	0.0002
<b>1050</b>	0.0033	0.0027	<b>1089</b>	0.0024	0.0009	<b>1128</b>	0.0037	0.0001
<b>1051</b>	0.0003	0.0042	<b>1090</b>	0.0001	0.0013	<b>1129</b>	0.0019	0.0000
<b>1052</b>	n.d.	n.d.	<b>1091</b>	0.0013	0.0002	<b>1130</b>	0.0034	0.0001
<b>1053</b>	0.0005	0.0023	<b>1092</b>	0.0044	0.0054	<b>1131</b>	0.0029	0.0001
<b>1054</b>	0.0026	0.0025	<b>1093</b>	0.0054	0.0012	<b>1132</b>	0.0017	0.0002
<b>1055</b>	0.0009	0.0006	<b>1094</b>	0.0020	0.0011	<b>1133</b>	0.0028	0.0001
<b>1056</b>	0.0006	0.0047	<b>1095</b>	0.0229	0.0092	<b>1134</b>	n.d.	n.d.
<b>1057</b>	0.0009	0.0020	<b>1096</b>	0.0027	0.0001	<b>1135</b>	0.0033	0.0001
<b>1058</b>	0.0029	0.0016	<b>1097</b>	0.0072	0.0072	<b>1136</b>	0.0027	0.0000
<b>1059</b>	0.0009	0.0012	<b>1098</b>	n.d.	n.d.	<b>1137</b>	0.0034	0.0064
<b>1060</b>	0.0072	0.0061	<b>1099</b>	0.0409	0.0126	<b>1138</b>	0.0030	0.0002
<b>1061</b>	0.0039	0.0040	<b>1100</b>	0.0187	0.0043	<b>1139</b>	0.0039	0.0001
<b>1062</b>	0.0038	0.0035	<b>1101</b>	0.0590	0.0234	<b>1140</b>	0.0031	0.0009
<b>1063</b>	0.0024	0.0006	<b>1102</b>	0.0179	0.0018	<b>1141</b>	n.d.	n.d.
<b>1064</b>	0.0081	0.0010	<b>1103</b>	0.0337	0.0169	<b>1142</b>	0.0006	0.0006
<b>1065</b>	0.0186	0.0084	<b>1104</b>	0.0043	0.0048	<b>1143</b>	0.0010	0.0014
<b>1066</b>	0.0221	0.0120	<b>1105</b>	0.0009	0.0012	<b>1144</b>	0.0059	0.0060
<b>1067</b>	0.0024	0.0016	<b>1106</b>	0.0039	0.0000	<b>1145</b>	0.0027	0.0014
<b>1068</b>	0.0058	0.0027	<b>1107</b>	0.0055	0.0044	<b>1146</b>	0.0086	0.0049
<b>1069</b>	n.d.	n.d.	<b>1108</b>	0.0059	0.0016	<b>1147</b>	0.0052	0.0021
<b>1070</b>	n.d.	n.d.	<b>1109</b>	0.0030	0.0005	<b>1148</b>	0.0047	0.0004

<b>1149</b>	0.0102	0.0049	<b>1165</b>	0.0019	0.0007	<b>1181</b>	0.0299	0.0036
<b>1150</b>	0.0031	0.0071	<b>1166</b>	0.0058	0.0044	<b>1182</b>	0.0069	0.0088
<b>1151</b>	0.0091	0.0000	<b>1167</b>	0.0037	0.0018	<b>1183</b>	0.0015	0.0008
<b>1152</b>	0.0029	0.0004	<b>1168</b>	0.0024	0.0001	<b>1184</b>	0.0019	0.0000
<b>1153</b>	0.0008	0.0047	<b>1169</b>	0.0052	0.0050	<b>1185</b>	0.0017	0.0015
<b>1154</b>	0.0030	0.0010	<b>1170</b>	0.0005	0.0002	<b>1186</b>	0.0022	0.0002
<b>1155</b>	0.0019	0.0001	<b>1171</b>	0.0030	0.0037	<b>1187</b>	0.0040	0.0020
<b>1156</b>	0.0026	0.0035	<b>1172</b>	0.0045	0.0036	<b>1188</b>	0.0037	0.0006
<b>1157</b>	0.0027	0.0020	<b>1173</b>	0.0043	0.0001	<b>1189</b>	0.0023	0.0027
<b>1158</b>	0.0098	0.0062	<b>1174</b>	0.0064	0.0026	<b>1190</b>	0.0044	0.0010
<b>1159</b>	0.0111	0.0055	<b>1175</b>	0.0009	0.0009	<b>1191</b>	0.0052	0.0069
<b>1160</b>	0.0004	0.0005	<b>1176</b>	0.0011	0.0002	<b>1192</b>	0.0058	0.0096
<b>1161</b>	0.0006	0.0020	<b>1177</b>	0.0016	0.0025	<b>1193</b>	0.0014	0.0016
<b>1162</b>	0.0007	0.0000	<b>1178</b>	0.0025	0.0012	<b>1194</b>	0.0032	0.0021
<b>1163</b>	0.0020	0.0004	<b>1179</b>	0.0037	0.0050	<b>1195</b>	0.0032	0.0023
<b>1164</b>	0.0011	0.0004	<b>1180</b>	0.0018	0.0019	<b>1196</b>	0.0011	0.0002

Compound relative values of backbone amide chemical shifts were calculated as described in Fig 4. Secondary chemical shifts could not be measured (n.d.) in several cases of heavy signal overlap and for proline residues.