

TABLE S3 Contact Energies of the URS Potential

	N	C^α	C	O	GC^α	C^β	KN^ζ	KC^δ	DO^δ	RN^η	NN^δ	RN^ε	SO^γ	HN^ε	YC^ζ	FC^ζ	LC^δ	CS^γ
N	-0.46	-0.63	-0.60	-0.79	1.18	-1.02	1.12	2.03	-0.19	0.25	-0.13	1.08	0.08	0.59	0.64	-1.13	-0.34	2.55
C^α	-0.63	-0.80	-0.73	-0.87	1.04	-1.28	0.71	1.63	-0.29	-0.16	-0.35	0.61	-0.12	0.23	0.34	-1.46	-0.76	2.47
C	-0.60	-0.73	-0.78	-0.98	1.06	-1.23	0.70	1.54	-0.20	-0.18	-0.37	0.55	-0.12	0.29	0.42	-1.41	-0.64	2.41
O	-0.79	-0.87	-0.98	-1.21	0.95	-1.38	0.46	1.32	-0.40	-0.34	-0.54	0.28	-0.26	0.07	0.28	-1.56	-0.79	2.31
GC^α	1.18	1.04	1.06	0.95	2.58	0.66	2.65	3.41	1.72	1.85	1.67	2.43	1.84	2.15	2.29	0.52	1.44	4.53
C^β	-1.02	-1.28	-1.23	-1.38	0.66	-1.78	0.37	1.26	-0.79	-0.49	-0.75	0.20	-0.54	-0.14	-0.19	-2.01	-1.28	2.09
KN^ζ	1.12	0.71	0.70	0.46	2.65	0.37	2.13	3.11	0.11	1.82	1.21	2.75	1.45	2.22	1.89	0.38	1.38	4.57
KC^δ	2.03	1.63	1.54	1.32	3.41	1.26	3.11	3.90	1.03	2.78	2.12	3.63	2.31	3.11	2.64	1.09	1.97	5.53
DO^δ	-0.19	-0.29	-0.20	-0.40	1.72	-0.79	0.11	1.03	-0.17	-0.51	0.02	0.17	0.12	0.33	0.69	-0.90	0.03	3.53
RN^η	0.25	-0.16	-0.18	-0.34	1.85	-0.49	1.82	2.78	-0.51	0.67	0.56	1.16	0.79	1.25	1.27	-0.54	0.44	3.98
NN^δ	-0.13	-0.35	-0.37	-0.54	1.67	-0.75	1.21	2.12	0.02	0.56	-0.14	1.18	0.39	1.05	0.87	-0.78	0.13	3.79
RN^ε	1.08	0.61	0.55	0.28	2.43	0.20	2.75	3.63	0.17	1.16	1.18	1.72	1.41	1.69	1.63	-0.04	0.90	4.40
SO^γ	0.08	-0.12	-0.12	-0.26	1.84	-0.54	1.45	2.31	0.12	0.79	0.39	1.41	0.44	1.04	1.17	-0.57	0.22	3.31
HN^ε	0.59	0.23	0.29	0.07	2.15	-0.14	2.22	3.11	0.33	1.25	1.05	1.69	1.04	0.84	1.50	-0.17	0.58	3.51
YC^ζ	0.64	0.34	0.42	0.28	2.29	-0.19	1.89	2.64	0.69	1.27	0.87	1.63	1.17	1.50	1.58	-0.28	0.52	3.70
FC^ζ	-1.13	-1.46	-1.41	-1.56	0.52	-2.01	0.38	1.09	-0.90	-0.54	-0.78	-0.04	-0.57	-0.17	-0.28	-2.33	-1.59	2.18
LC^δ	-0.34	-0.76	-0.64	-0.79	1.44	-1.28	1.38	1.97	0.03	0.44	0.13	0.90	0.22	0.58	0.52	-1.59	-1.19	2.81
CS^γ	2.55	2.47	2.41	2.31	4.53	2.09	4.57	5.53	3.53	3.98	3.79	4.40	3.31	3.51	3.70	2.18	2.81	3.98