

INTERDOMAIN FLEXIBILITY IN FULL-LENGTH MATRIX METALLOPROTEINASE-1 (MMP-1)*

**Ivano Bertini,^{*,1,2} Marco Fragai,^{1,3} Claudio Luchinat,^{1,3} Maxime Melikian,¹ Efstratios Mylonas,⁴
Niko Sarti,^{1,2} Dmitri I. Svergun^{4,5}**

¹ Magnetic Resonance Center (CERM) – University of Florence, Via L. Sacconi 6, 50019 Sesto Fiorentino, Italy.

² Department of Chemistry – University of Florence, Via della Lastruccia 3, 50019 Sesto Fiorentino, Italy.

³ Department of Agricultural Biotechnology, University of Florence, Via Maragliano, 75-77, 50144 Florence, Italy.

⁴ European Molecular Biology Laboratory, Hamburg Outstation, Notkestrasse 85, 22603 Hamburg, Germany.

⁵ Institute of Crystallography, Russian Academy of Sciences, Leninsky pr. 59, 117333 Moscow, Russia

*Address correspondence to: Ivano Bertini, via L. Sacconi 6, 50019 Sesto Fiorentino, Italy, Tel.: +390554574272. Fax: +390554574271. E-mail: ivanobertini@cerm.unifi.it

Supplemental Data

INDEX

Table S1.....	3
Table S2.....	9
Table S3.....	12
Table S4.....	15
Table S5.....	21

Table S1. Backbone assigned resonances for the FL-MMP1-NNGH adduct (pH 7.2, 306K).

Chemical shifts (ppm)

Residue	H	N	CA	CB
MET	105			
ASN	106			
PRO	107		60.20	
ARG	108	114.42	50.98	29.09
TRP	109	122.56	54.24	26.88
GLU	110	124.43	54.56	26.55
GLN	111	118.65	51.34	26.74
THR	112	106.73	58.56	66.14
HIS	113	120.50	50.95	26.35
LEU	114	127.53	50.34	41.94
THR	115	111.46	55.33	69.73
TYR	116	117.64	52.23	39.84
ARG	117	119.57	52.00	30.89
ILE	118	128.61	58.18	33.52
GLU	119	129.03	56.44	27.87
ASN	120	115.04	48.93	36.04
TYR	121	115.23	55.56	36.76
THR	122		55.60	66.70
PRO	123		59.95	27.88
ASP	124	122.03	52.94	38.11
LEU	125	116.93	48.39	43.76
PRO	126		59.44	27.64
ARG	127	126.06	57.19	26.20
ALA	128	117.59	51.90	14.89
ASP	129	116.98	54.27	38.22
VAL	130	124.06	63.59	27.90
ASP	131	118.67	55.14	36.99
HIS	132	118.69	56.43	26.85
ALA	133	120.96	52.15	18.40
ILE	134	116.46	59.63	32.76
GLU	135	121.93	57.32	29.60
LYS	136	117.28	55.21	31.60
ALA	137	123.08	52.44	14.47
PHE	138	115.08	60.42	35.35
GLN	139	118.36	55.29	24.98
LEU	140	117.68	54.63	41.70
TRP	141	115.83	55.25	27.28
SER	142	116.63	58.06	63.20
ASN	143	116.63	52.17	35.93
VAL	144	105.22	57.27	28.85
THR	145	111.05	56.98	69.01
PRO	146		59.47	28.08
LEU	147	117.28	51.93	39.85
THR	148	113.82	57.11	68.65
PHE	149	118.88	53.07	38.42
THR	150	120.53	58.74	68.39
LYS	151	129.81	52.57	29.56
VAL	152	122.96	56.68	30.22
SER	153	116.66	56.02	60.74
GLU	154	118.44	51.81	29.32
GLY	155	108.18	41.67	
GLN	156	119.02	52.42	25.95
ALA	157	126.61	46.75	18.96
ASP	158	121.39	55.43	33.50
ILE	159	124.96	58.38	35.60
MET	160	126.74	50.08	27.91
ILE	161	127.21	57.44	36.92
SER	162	118.32	53.94	62.80
PHE	163	122.67	54.01	37.06
VAL	164	117.25	55.99	33.30

ARG	165	8.54	118.01	51.19	30.50
GLY	166	9.32	107.92	43.72	
ASP	167	8.40	123.24	52.04	37.00
HIS	168	9.30	124.91	51.05	23.56
ARG	169	8.13	112.24	55.08	23.05
ASP	170	7.15	116.28	49.31	37.45
ASN	171	7.73	113.60	51.03	34.75
SER	172	7.61	115.36	51.51	60.47
PRO	173			60.11	28.14
PHE	174	8.24	120.56	55.69	36.35
ASP	175	8.48	116.02	50.55	38.25
GLY	176	8.80	110.84	41.29	
PRO	177			60.82	27.98
GLY	178	11.53	119.88	40.18	
GLY	179	8.50	110.88	43.41	
ASN	180	10.86	127.07	51.89	35.86
LEU	181	8.40	123.43	52.71	44.38
ALA	182	7.44	113.80	48.46	19.21
HIS	183	8.93	115.03	50.97	27.70
ALA	184	8.51	122.88	47.43	21.09
PHE	185	8.12	120.45	54.19	38.15
GLN	186	8.20	118.52	51.43	23.45
PRO	187			61.18	31.60
GLY	188	5.64	107.72	41.07	
PRO	189			59.52	32.80
GLY	190	8.89	111.41	44.19	
ILE	191	8.98	135.02	58.82	37.83
GLY	192	7.63	106.70	43.71	
GLY	193	7.60	119.16	43.63	
ASP	194	8.36	123.18	52.96	36.71
ALA	195	8.40	119.08	47.93	18.25
HIS	196	8.94	120.97	48.04	30.41
PHE	197	8.78	122.20	53.61	37.96
ASP	198	7.88	122.51	51.31	36.42
GLU	199	9.84	131.25	53.31	27.46
HIS	200	8.87	118.88	53.56	35.74
GLU	201	7.33	115.79	50.18	23.90
ARG	202	7.82	126.38	51.66	25.29
TRP	203	9.16	130.32	52.94	27.69
THR	204	9.20	112.29	56.86	71.30
ASN	205	8.31	117.60	48.24	35.38
ASN	206	7.87	119.13	49.45	35.02
PHE	207	7.38	113.20	55.01	35.20
ARG	208	7.85	124.10	52.88	26.54
GLU	209	8.44	121.22	49.48	24.17
TYR	210	8.19	124.45	59.09	37.75
ASN	211	8.51	124.17	52.18	36.78
LEU	212	8.91	129.94	54.96	37.75
HIS	213	8.81	119.69	57.13	25.30
ARG	214	8.83	117.84	56.05	26.03
VAL	215	7.76	117.38	63.01	28.33
ALA	216	9.79	122.85	52.11	14.26
ALA	217	8.36	118.58	53.52	15.01
HIS	218	7.11	115.19	55.54	26.01
ALA	219	9.00	121.47	52.94	13.86
LEU	220	8.67	114.03	53.15	36.82
GLY	221	7.36	107.07	44.78	
HIS	222	7.12	120.68	55.18	24.58
SER	223	7.95	118.38	59.94	
LEU	224	7.17	114.51	51.81	38.93
GLY	225	8.22	108.38	41.43	
LEU	226	8.14	120.41	52.12	38.27
SER	227	8.28	117.16	53.35	61.57
HIS	228	8.31	117.44	53.08	25.86
SER	229	6.87	114.77	52.31	61.81
THR	230	8.52	114.92	59.01	65.97
ASP	231	8.85	126.15	50.56	38.10
ILE	232	7.77	124.29	59.72	34.46
GLY	233	8.51	108.99	41.66	
ALA	234	8.05	124.40	48.56	15.43

LEU	235	12.28	132.15	54.74	37.94
MET	236	8.35	112.84	50.40	23.73
TYR	237	8.08	128.64	54.11	35.40
PRO	238			59.75	26.80
SER	239	8.09	116.38	54.56	61.77
TYR	240	9.18	124.76	58.56	38.40
THR	241	7.12	119.75	58.07	68.18
PHE	242			58.00	38.40
SER	243			56.70	64.28
GLY	244	6.14	108.91	42.41	
ASP	245	7.78	120.64	50.59	42.20
VAL	246	8.54	123.79	59.82	27.92
GLN	247	8.15	124.65	50.54	28.45
LEU	248	8.46	120.16	52.12	38.12
ALA	249	9.83	126.27	47.17	17.30
GLN	250	9.00	123.49	56.17	24.15
ASP	251	8.65	115.30	55.44	40.64
ASP	252	7.02	115.29	54.44	40.92
ILE	253	7.81	119.99	62.75	35.05
ASP	254	9.12	119.57	54.30	36.81
GLY	255	8.09	107.51	44.30	
ILE	256	8.56	122.39	58.30	35.17
GLN	257	8.78	124.31	58.49	23.74
ALA	258	7.81	118.95	51.50	14.53
ILE	259	6.95	114.65	60.81	36.31
TYR	260	7.72	113.67	56.95	37.15
GLY	261	8.28	109.35	40.98	
ARG	262	7.86	114.47	52.32	28.35
SER	263	7.48	114.43	55.17	60.43
GLN	264				
ASN	265				
PRO	266			60.50	
VAL	267	8.00	120.28	59.07	
GLN	268	8.24	125.32	50.31	25.76
PRO	269			60.02	
ILE	270	8.06	120.44	57.77	35.78
GLY	271	8.24	112.73	41.42	
PRO	272				
GLN	273				
THR	274				
PRO	275			59.70	28.90
LYS	276	7.99	120.28	51.73	
ALA	277	8.08	124.45	51.64	14.59
CYS	278	7.81	108.47	50.86	35.88
ASP	279	7.48	122.64	51.26	39.16
SER	280				
LYS	281	8.48	121.07	52.58	
LEU	282	7.16	123.75	53.73	39.15
THR	283	6.71	112.63	55.96	67.98
PHE	284	9.16	114.64	54.81	39.13
ASP	285	9.12	121.96	52.87	
ALA	286	7.78	119.20	48.91	17.39
ILE	287	8.71	122.01	57.77	41.70
THR	288	8.55	117.06	57.28	66.42
THR	289	6.96	115.27	58.32	67.02
ILE	290	8.48	118.44	58.39	36.10
ARG	291	10.34	130.93	54.19	25.13
GLY	292	9.25	106.61	42.52	
GLU	293	7.84	120.26	51.83	
VAL	294	8.30	120.98	59.70	28.40
MET	295	8.48	126.36	51.43	32.35
PHE	296	8.93	123.51	52.82	
PHE	297	8.81	118.32	55.07	38.21
LYS	298	9.16	124.21	52.80	31.59
ASP	299	10.15	129.21	54.25	36.69
ARG	300	7.38	121.87	53.32	27.44
PHE	301	8.99	121.40	55.30	39.37
TYR	302	8.95	116.29	52.32	39.17
MET	303	9.06	118.27	50.96	33.51
ARG	304	9.14	123.38	51.80	31.27

THR	305	9.05	118.63	57.63	67.28
ASN	306	8.91	124.01	47.88	38.00
PRO	307			61.22	
PHE	308	8.42	116.66	55.21	36.04
TYR	309	7.90	119.82	51.97	
PRO	310			61.08	
GLU	311	7.81	119.79	53.50	27.75
VAL	312	8.38	124.10	58.81	29.39
GLU	313	8.38	129.17	52.33	28.16
LEU	314	8.10	129.61	50.67	41.15
ASN	315	7.83	122.61	48.05	38.70
PHE	316	8.97	119.16	54.75	36.30
ILE	317	8.91	125.73	64.07	36.16
SER	318	8.57	111.41	57.07	59.84
VAL	319	7.41	120.02	61.69	28.16
PHE	320	7.16	121.08	56.19	36.81
TRP	321	8.12	114.57	52.03	25.84
PRO	322			61.71	
GLN	323	8.20	113.67	53.48	25.37
LEU	324	7.27	120.64	49.04	38.49
PRO	325			58.80	28.27
ASN	326	7.41	110.71	48.92	36.63
GLY	327	7.80	109.41	45.05	
LEU	328	8.34	121.41	52.03	38.93
GLU	329	8.56	116.86	53.93	
ALA	330	7.76	117.15	48.71	18.67
ALA	331	8.86	123.83	48.64	19.75
TYR	332	8.95	115.49	54.31	37.32
GLU	333	7.80	122.05	51.01	29.20
PHE	334	9.32	128.93	50.97	34.80
ALA	335	9.26	130.69	52.87	14.78
ASP	336	7.97	116.72	53.70	37.32
ARG	337	6.28	113.15	51.21	28.03
ASP	338	7.97	120.80	51.68	36.74
GLU	339	7.05	114.62	51.32	32.25
VAL	340	8.71	124.07	57.58	29.77
ARG	341	8.76	126.00	51.40	29.32
PHE	342	8.68	119.55	53.46	40.06
PHE	343	8.80	119.81	54.82	
LYS	344	8.74	121.94	55.27	32.20
GLY	345	10.32	122.44	44.05	
ASN	346	8.05	121.50	48.52	33.55
LYS	347	7.87	119.25	51.38	33.73
TYR	348	8.48	116.08	52.05	38.34
TRP	349	9.10	120.74	55.19	31.80
ALA	350			46.56	
VAL	351	9.03	117.93	56.08	31.35
GLN	352	8.41	123.63	52.05	28.68
GLY	353	9.41	118.26	44.05	
GLN	354	8.88	125.01	53.64	
ASN	355	8.04	117.74	50.14	37.28
VAL	356	8.59	125.21	59.73	28.10
LEU	357	8.20	129.93	52.78	38.25
HIS	358	8.41	120.26	55.07	26.97
GLY	359			41.80	
TYR	360	7.28	117.40	54.05	34.58
PRO	361				
LYS	362			51.43	
ASP	363	8.13	117.80	50.30	40.46
ILE	364	8.00	112.96	61.59	33.90
TYR	365	7.59	125.29	57.52	33.14
SER	366	9.54	116.75	57.81	59.46
SER	367			58.01	
PHE	368	7.03	114.74	55.18	
GLY	369	7.48	103.52	42.68	
PHE	370	6.37	115.81	54.88	35.33
PRO	371				
ARG	372	8.55	118.21	54.98	24.83
THR	373	6.97	105.69	59.28	65.40
VAL	374	7.74	124.24	60.57	27.81

LYS	375				
HIS	376	7.21	112.80	51.42	28.14
ILE	377	9.94	122.91	55.96	
ASP	378	8.49	122.89	53.92	
ALA	379	7.95	118.45	49.12	18.91
ALA	380	8.88	124.15	48.68	
LEU	381	8.07	116.11	52.05	
SER	382	8.65	118.46	53.83	
GLU	383	9.16	130.82	53.10	28.12
GLU	384	8.21	129.36	55.82	
ASN	385	9.07	115.94	52.94	
THR	386	7.80	108.26	59.08	68.21
GLY	387	8.36	110.59	43.30	
LYS	388	7.69	115.88	49.89	29.62
THR	389	9.30	122.61	57.31	67.11
TYR	390	8.94	125.97	53.19	
PHE	391	8.68	119.33	53.43	
PHE	392			55.55	
VAL	393	9.48	125.73	59.24	31.41
ALA	394	8.41	119.21	51.22	
ASN	395	8.31	116.70	50.60	35.25
LYS	396				
TYR	397				
TRP	398				
ARG	399			51.06	30.95
TYR	400	9.55	130.33	54.00	39.81
ASP	401	7.71	127.38	49.94	40.08
GLU	402	8.83	123.59	54.56	
TYR	403	8.04	117.47	56.55	
LYS	404	8.77	120.63	53.96	
ARG	405	7.91	116.32	53.58	22.65
SER	406	6.93	110.21	53.82	62.40
MET	407	8.94	125.68	52.87	
ASP	408	9.07	115.69	53.28	
PRO	409			60.92	28.16
GLY	410	8.12	109.43	42.32	
TYR	411	7.49	117.96	54.36	
PRO	412				
LYS	413				
MET	414	8.66	117.78	51.97	
ILE	415	8.53	126.03	63.64	
ALA	416	9.02	117.60	50.81	15.02
HIS	417	6.88	112.43	54.19	27.80
ASP	418	6.79	115.90	51.89	39.32
PHE	419				
PRO	420				
GLY	421			42.31	
ILE	422	6.96	114.76	57.14	33.15
GLY	423	7.31	108.17	41.26	
HIS	424	7.77	115.48	52.56	28.36
LYS	425	7.29	118.18	52.20	31.42
VAL	426	9.79	125.63	58.62	
ASP	427	9.15	124.86	52.76	37.47
ALA	428	7.96	119.86	48.48	19.36
VAL	429	8.44	119.28	56.39	30.97
PHE	430	7.83	118.63	53.61	
MET	431	8.76	121.11	50.94	
LYS	432	8.81	125.06	54.19	32.82
ASP	433			52.82	
GLY	434	8.53	102.50	42.05	
PHE	435	7.80	117.44	54.07	37.75
PHE	436	8.80	119.49	50.92	36.10
TYR	437	8.69	122.81	54.51	35.16
PHE	438	8.72	120.60	54.70	39.85
PHE	439	8.96	119.50	53.94	
HIS	440	9.16	123.21	52.93	28.34
GLY	441	9.79	120.89	44.12	
THR	442	8.41	116.44	59.15	65.77
ARG	443	8.21	123.39	53.07	28.81
GLN	444	8.05	121.30	49.49	

TYR	445	9.64	126.67	52.96	37.78
LYS	446	8.26	125.38	52.57	30.09
PHE	447	9.80	131.86	53.93	40.33
ASP	448	8.37	128.18	47.17	39.81
PRO	449			60.59	
LYS	450	8.00	118.03	55.91	28.14
THR	451	6.84	106.06	58.33	67.08
LYS	452	7.92	118.84	54.17	25.49
ARG	453	6.53	114.87	51.18	30.22
ILE	454	8.39	121.50	58.08	34.94
LEU	455	9.19	128.57	53.03	39.70
THR	456	7.15	109.40	57.80	68.47
LEU	457	8.11	126.66	51.37	39.88
GLN	458	9.04	124.12	50.66	29.74
LYS	459	8.53	120.62	52.97	29.57
ALA	460	8.34	124.96	52.06	14.32
ASN	461	7.63	112.21	49.52	34.75
SER	462	7.37	115.26	59.21	
TRP	463	7.93	121.87	55.67	24.26
PHE	464	7.24	116.79	51.19	34.59
ASN	465	8.09	117.23	50.97	33.99
CYS	466	8.34	119.41	53.02	38.60
ARG	467				
LYS	468	8.35	123.38	53.30	29.33
ASN	469	7.93	125.68	51.77	37.10

Table S2. Backbone assigned resonances for the CAT-MMP1-NNGH adduct (pH 7.2, 306K).

Chemical shifts (ppm)

Residue		H	N	CA	CB
MET	105				
ASN	106				
PRO	107			62.95	32.20
ARG	108	7.81	112.17	53.76	32.60
TRP	109	8.09	120.11	57.01	29.90
GLU	110	9.27	122.20	57.05	29.70
GLN	111	8.48	116.58	54.15	29.80
THR	112	8.05	104.93	61.45	68.90
HIS	113	7.36	118.31	53.83	29.43
LEU	114	8.33	125.07	53.10	45.50
THR	115	9.31	109.33	58.00	72.70
TYR	116	8.65	115.46	54.90	43.10
ARG	117	8.45	117.26	54.70	34.30
ILE	118	9.24	126.44	60.93	37.00
GLU	119	9.80	126.80	59.30	31.30
ASN	120	7.86	112.63	51.58	39.10
TYR	121	8.51	112.81	58.26	40.70
THR	122			55.60	66.70
PRO	123			62.60	31.30
ASP	124	9.01	119.77	55.72	41.27
LEU	125	7.13	114.60	51.05	47.30
PRO	126			62.22	32.10
ARG	127	8.71	123.80	60.00	29.60
ALA	128	8.80	115.26	54.70	18.20
ASP	129	7.41	114.67	57.00	41.00
VAL	130	7.75	121.74	66.45	31.10
ASP	131	8.66	116.40	57.88	40.00
HIS	132	8.34	116.43	59.19	30.46
ALA	133	8.12	118.67	55.01	18.40
ILE	134	8.01	114.01	62.41	36.00
GLU	135	8.90	119.75	60.21	29.60
LYS	136	8.70	115.04	57.98	31.60
ALA	137	7.64	120.90	55.29	17.80
PHE	138	7.92	112.84	63.30	38.60
GLN	139	8.23	116.38	58.19	28.20
LEU	140	7.44	115.55	57.33	41.70
TRP	141	6.86	113.51	58.11	30.40
SER	142	9.33	115.29	61.10	63.20
ASN	143	8.08	114.30	54.87	38.90
VAL	144	7.22	103.82	60.00	32.40
THR	145	7.62	109.01	59.50	71.90
PRO	146			62.12	31.50
LEU	147	7.12	115.67	54.39	43.40
THR	148	8.26	111.53	59.92	71.70
PHE	149	8.39	117.05	55.70	41.70
THR	150	8.68	118.49	61.51	71.18
LYS	151	8.47	127.60	55.40	33.10
VAL	152	8.81	120.42	59.35	33.90
SER	153	8.86	114.12	58.75	64.00
GLU	154	7.59	116.02	54.52	32.60
GLY	155	8.59	105.78	44.40	
GLN	156	8.35	116.59	55.20	29.10
ALA	157	7.78	124.60	49.49	22.10
ASP	158	8.15	119.09	58.26	41.26
ILE	159	8.90	122.48	61.15	39.30
MET	160	7.62	124.52	52.80	31.70
ILE	161	9.34	125.12	60.10	40.30
SER	162	8.74	116.02	56.64	66.10
PHE	163	9.12	120.21	56.69	40.40
VAL	164	9.02	114.83	58.65	36.70

ARG	165	8.67	115.58	53.90	33.90
GLY	166	9.42	105.58	46.57	
ASP	167	9.17	125.88	54.80	40.10
HIS	168	9.42	122.57	53.68	26.50
ARG	169	8.24	109.70	57.87	26.10
ASP	170	7.26	113.94	52.00	40.40
ASN	171	7.54	110.53	53.57	37.70
SER	172	7.71	112.97	54.30	63.60
PRO	173			62.85	31.50
PHE	174	8.34	118.28	58.44	39.50
ASP	175	8.59	113.73	53.30	41.16
GLY	176	8.92	108.44	44.00	
PRO	177			63.50	31.20
GLY	178	11.67	117.59	43.00	
GLY	179	8.64	108.51	46.15	
ASN	180	10.98	124.72	54.64	38.92
LEU	181	8.53	121.19	55.40	44.38
ALA	182	7.56	111.52	51.18	22.68
HIS	183	9.04	112.61	53.78	30.50
ALA	184	8.62	120.53	50.18	24.31
PHE	185	8.19	118.07	56.90	41.10
GLN	186	8.34	116.32	54.19	26.60
PRO	187			64.40	31.60
GLY	188	5.79	105.59	43.90	
PRO	189			62.20	32.80
GLY	190	9.04	109.04	46.94	
ILE	191	9.13	132.69	61.50	37.83
GLY	192	7.74	104.38	46.50	
GLY	193	7.69	116.73	46.47	
ASP	194	8.44	120.86	55.70	39.80
ALA	195	8.50	116.84	50.70	21.70
HIS	196	9.04	118.66	50.75	33.50
PHE	197	8.88	119.90	56.40	41.62
ASP	198	8.00	120.24	53.80	39.90
GLU	199	9.99	128.90	56.10	30.90
HIS	200	8.96	116.45	56.24	38.90
GLU	201	7.43	113.42	52.90	27.20
ARG	202	7.93	124.05	54.41	28.90
TRP	203	9.30	128.15	55.69	30.80
THR	204	9.31	109.91	59.54	71.30
ASN	205	8.44	115.17	50.90	38.70
ASN	206	7.96	116.89	52.14	38.00
PHE	207	7.54	110.72	57.88	38.50
ARG	208	7.99	121.79	55.68	29.70
GLU	209	8.59	119.04	52.30	27.40
TYR	210	8.30	122.34	61.99	41.85
ASN	211	8.64	121.87	54.91	39.73
LEU	212	9.02	127.62	57.75	41.55
HIS	213	8.93	117.32	59.99	28.27
ARG	214	8.93	115.43	58.89	29.46
VAL	215	7.84	114.88	65.89	31.66
ALA	216	9.91	120.53	54.93	17.50
ALA	217	8.49	116.40	56.44	18.39
HIS	218	7.26	113.18	58.42	28.88
ALA	219	9.13	119.30	55.76	17.55
LEU	220	8.76	111.62	55.90	40.10
GLY	221	7.47	104.75	47.64	
HIS	222	7.20	118.30	57.89	27.57
SER	223	8.01	115.99	62.63	
LEU	224	7.27	112.17	54.70	42.30
GLY	225	8.28	105.54	44.14	
LEU	226	8.21	118.12	55.05	42.10
SER	227	8.40	114.85	56.15	64.74
HIS	228	8.44	114.87	55.88	29.20
SER	229	6.97	112.33	55.02	65.02
THR	230	8.65	112.49	61.70	68.80
ASP	231	9.00	123.85	53.38	41.10
ILE	232	7.90	122.08	62.50	38.14
GLY	233	8.66	107.50	44.38	
ALA	234	8.13	122.09	51.35	19.07

LEU	235	12.30	129.87	57.53	41.30
MET	236	8.50	110.43	53.05	26.90
TYR	237	8.17	126.31	56.79	38.70
PRO	238			62.37	26.80
SER	239	8.24	114.27	57.28	64.40
TYR	240	9.30	124.81	60.64	38.40
THR	241	7.26	117.41	60.92	71.70
PHE	242			58.00	38.40
SER	243			56.70	64.28
GLY	244	6.20	106.68	45.23	
ASP	245	7.90	118.30	53.11	42.20
VAL	246	8.66	121.30	62.64	31.53
GLN	247	8.30	122.25	53.26	32.20
LEU	248	8.57	118.04	54.87	41.50
ALA	249	9.95	124.39	49.81	20.80
GLN	250	9.14	121.22	59.00	27.30
ASP	251	8.81	112.98	58.25	43.90
ASP	252	7.17	113.05	57.15	44.10
ILE	253	7.87	117.99	65.50	38.30
ASP	254	9.27	117.49	57.00	39.60
GLY	255	8.21	105.39	47.06	
ILE	256	8.64	120.50	61.12	38.70
GLN	257	8.86	122.27	58.38	27.10
ALA	258	7.86	119.05	53.99	17.70
ILE	259	7.16	112.84	63.48	39.60
TYR	260	7.89	112.99	59.44	39.88
GLY	261	8.17	113.49	45.89	

Table S3. Backbone assigned resonances for the MMP1 HPX domain (pH 7.2, 306K).

Chemical shifts (ppm)

Residue		H	N	CA	CB
MET	274				
PRO	275			60.04	29.21
LYS	276	7.96	120.79	52.23	30.79
ALA	277	8.02	124.55	51.97	15.44
CYS	278	7.71	109.45	51.38	36.61
ASP	279	7.38	123.02	51.63	39.76
SER	280			57.81	60.68
LYS	281	8.43	121.54	52.90	28.76
LEU	282	7.10	124.26	54.05	40.02
THR	283	6.65	113.25	56.15	68.30
PHE	284	9.11	115.03	55.08	39.81
ASP	285	9.11	122.87	52.96	39.42
ALA	286	7.73	120.00	49.20	18.05
ILE	287	8.65	122.59	58.02	41.70
THR	288	8.51	117.60	57.64	66.97
THR	289	6.87	115.81	58.50	67.52
ILE	290	8.42	118.94	58.67	36.49
ARG	291	10.31	131.74	54.49	25.98
GLY	292	9.22	107.11	42.81	
GLU	293	7.78	120.75	52.12	29.12
VAL	294	8.25	121.47	60.04	29.17
MET	295	8.44	127.00	51.71	33.34
PHE	296	8.89	124.15	53.04	38.38
PHE	297	8.74	118.80	55.24	38.21
LYS	298	9.07	124.69	53.03	32.47
ASP	299	10.07	129.78	54.45	37.45
ARG	300	7.47	122.37	53.57	28.39
PHE	301	8.98	122.59	55.47	39.91
TYR	302	8.91	116.88	52.56	40.05
MET	303	8.99	118.96	51.19	34.41
ARG	304	9.05	124.17	52.01	31.83
THR	305	8.96	119.22	57.83	67.73
ASN	306	8.86	124.48	48.08	38.53
PRO	307			61.50	29.23
PHE	308	8.36	117.25	55.49	36.62
TYR	309	7.86	120.33	52.21	
PRO	310			61.28	28.77
GLU	311	7.76	120.35	53.84	28.16
VAL	312	8.32	124.71	59.14	30.26
GLU	313	8.28	129.74	52.54	28.65
LEU	314	8.15	130.09	50.99	41.99
ASN	315	7.85	123.85	48.23	39.36
PHE	316	8.82	119.56	54.82	37.02
ILE	317	8.87	126.43	64.51	36.88
SER	318	8.52	111.85	57.40	60.40
VAL	319	7.34	120.50	61.92	28.91
PHE	320	7.10	121.99	56.70	37.68
TRP	321	8.14	115.14	52.38	
PRO	322			61.97	29.22
GLN	323	8.16	114.30	53.75	26.25
LEU	324	7.25	121.30	49.19	38.49
PRO	325			58.96	28.97
ASN	326	7.36	111.21	49.11	37.03
GLY	327	7.75	109.94	45.39	
LEU	328	8.26	121.96	52.26	40.02
GLU	329	8.49	117.51	54.12	29.26
ALA	330	7.71	117.68	48.97	19.31
ALA	331	8.80	124.35	48.93	20.74
TYR	332	8.90	116.10	54.52	37.67
GLU	333	7.75	122.60	51.23	30.04

PHE	334	9.26	129.49	51.21	35.53
ALA	335	9.23	131.37	53.23	15.40
ASP	336	7.94	117.32	53.95	37.90
ARG	337	6.22	113.64	51.41	29.04
ASP	338	7.91	121.26	51.90	37.15
GLU	339	6.98	115.01	51.57	33.12
VAL	340	8.66	124.56	57.94	30.53
ARG	341	8.72	126.76	51.71	30.12
PHE	342	8.62	120.28	53.76	40.81
PHE	343	8.73	120.34	54.96	39.32
LYS	344	8.66	122.41	55.62	33.34
GLY	345	10.29	123.02	44.29	
ASN	346	7.99	122.14	48.64	33.90
LYS	347	7.79	119.69	51.65	34.23
TYR	348	8.43	116.77	52.20	39.32
TRP	349	9.04	121.33	55.47	32.41
ALA	350			46.86	18.60
VAL	351	8.99	118.74	56.36	32.49
GLN	352	8.36	124.35	52.38	29.52
GLY	353	9.39	119.02	44.35	
GLN	354	8.86	125.63	53.89	27.08
ASN	355	7.97	118.37	50.28	37.77
VAL	356	8.55	125.85	60.14	28.70
LEU	357	8.17	130.67	53.02	39.27
HIS	358	8.38	120.68	55.48	27.90
GLY	359			42.09	
TYR	360	7.21	117.81	54.33	35.20
PRO	361				
LYS	362			51.65	34.23
ASP	363	8.09	118.39	50.43	41.09
ILE	364	7.91	113.31	61.82	34.52
TYR	365	7.53	125.83	57.87	33.73
SER	366	9.48	117.48	57.81	59.92
SER	367			58.22	60.99
PHE	368	6.96	115.22	55.35	38.16
GLY	369	7.43	103.97	42.94	
PHE	370	6.29	116.27	55.18	36.22
PRO	371			59.32	29.56
ARG	372	8.44	118.60	54.98	25.97
THR	373	6.91	106.08	59.52	65.88
VAL	374	7.70	124.78	60.92	28.67
LYS	375			53.27	30.94
HIS	376	7.16	113.31	51.76	28.94
ILE	377	9.93	123.72	56.21	38.52
ASP	378	8.42	123.63	53.92	39.06
ALA	379	7.90	119.09	49.33	20.01
ALA	380	8.82	124.97	48.92	21.27
LEU	381	8.02	116.80	52.31	42.58
SER	382	8.59	119.01	54.19	62.64
GLU	383	9.09	131.50	53.43	28.12
GLU	384	8.17	130.10	56.04	27.33
ASN	385	9.03	116.40	53.23	35.53
THR	386	7.73	108.65	59.31	68.56
GLY	387	8.35	111.23	43.59	
LYS	388	7.63	116.33	50.14	30.76
THR	389	9.24	123.16	57.53	67.52
TYR	390	8.86	126.55	53.40	38.12
PHE	391	8.60	119.80	53.45	
PHE	392			55.80	36.76
VAL	393	9.41	126.26	59.57	32.67
ALA	394	8.35	119.62	51.52	14.07
ASN	395	8.26	117.11	50.88	35.25
LYS	396				
TYR	397				
TRP	398				
ARG	399			51.43	31.84
TYR	400	9.48	130.89	54.28	40.57
ASP	401	7.64	127.93	50.06	40.92
GLU	402	8.80	124.15	54.91	
TYR	403	7.99	117.97	56.77	34.52

LYS	404	8.71	121.23	54.28	30.06
ARG	405	7.85	116.86	53.84	23.51
SER	406	6.88	110.69	54.13	63.13
MET	407	8.91	126.19	52.87	35.40
ASP	408	9.03	115.59	53.69	
PRO	409			61.22	28.90
GLY	410	8.09	109.94	42.63	
TYR	411	7.44	118.52	54.53	
PRO	412				
LYS	413			51.71	34.15
MET	414	8.62	118.37	52.23	27.88
ILE	415	8.47	126.66	64.05	36.42
ALA	416	9.01	118.24	51.17	15.66
HIS	417	6.82	112.81	54.38	28.27
ASP	418	6.70	116.58	52.13	39.32
PHE	419				
PRO	420				
GLY	421			42.66	
ILE	422	6.90	115.14	57.51	34.07
GLY	423	7.29	108.81	41.51	
HIS	424	7.74	115.89	52.95	29.12
LYS	425	7.24	118.79	52.40	32.45
VAL	426	9.77	126.52	58.88	31.59
ASP	427	9.07	125.72	52.98	38.51
ALA	428	7.89	120.54	48.71	19.37
VAL	429	8.38	119.82	56.62	30.97
PHE	430	7.78	119.22	53.92	37.95
MET	431	8.70	121.56	51.11	32.93
LYS	432	8.75	125.60	54.51	33.79
ASP	433			53.03	37.43
GLY	434	8.50	102.94	42.34	
PHE	435	7.74	117.95	54.36	38.70
PHE	436	8.74	120.04	51.08	36.92
TYR	437	8.62	123.30	54.72	35.82
PHE	438	8.65	121.19	54.99	40.58
PHE	439	8.88	120.06	54.12	38.12
HIS	440	9.08	123.52	53.45	28.97
GLY	441	9.73	121.75	44.41	
THR	442	8.38	116.70	59.36	66.11
ARG	443	8.14	123.92	53.41	29.78
GLN	444	7.96	121.98	49.72	29.41
TYR	445	9.57	127.28	53.23	38.49
LYS	446	8.21	125.98	52.88	31.17
PHE	447	9.74	132.46	54.19	41.11
ASP	448	8.31	128.78	47.33	40.49
PRO	449			60.92	29.51
LYS	450	7.95	118.52	56.21	29.03
THR	451	6.76	106.47	58.55	67.32
LYS	452	7.86	119.17	54.42	26.45
ARG	453	6.47	115.29	51.39	31.15
ILE	454	8.36	122.10	58.51	35.89
LEU	455	9.13	129.26	53.35	40.50
THR	456	7.09	109.98	58.00	68.94
LEU	457	8.09	127.24	51.56	40.96
GLN	458	8.99	124.71	50.88	30.63
LYS	459	8.50	121.30	53.31	30.46
ALA	460	8.27	125.55	52.33	15.24
ASN	461	7.55	112.57	49.70	35.18
SER	462	7.30	115.91	59.78	60.28
TRP	463	7.87	122.48	55.81	24.77
PHE	464	7.18	117.24	51.35	35.41
ASN	465	8.01	117.52	51.06	34.41
CYS	466	8.33	119.78	53.31	38.60
ARG	467			53.43	28.09
LYS	468	8.27	123.99	53.56	30.32
ASN	469	7.89	126.33	51.96	37.63

Table S4. ^{15}N R_1 , R_2 , NOE on the FL-MMP-1 and on the isolated CAT/HPX domains at 700 (pH 7.2, 306K).

Residue	Number	R_1 (s^{-1})				R_2 (s^{-1})				NOE
		FL		Single		FL		Single		FL
		Exp.	Calc.	Exp.	Calc.	Exp.	Calc.	Exp.	Calc.	Exp.
GLY	105		0,51		1,41		33,78		11,83	
ASN	106		0,50		1,40		34,36		11,95	
PRO	107									
ARG	108	0,88	0,43	1,44	1,40	17,85	39,53	8,00	11,95	0,59
TRP	109	0,77	0,44	1,43	1,39	24,80	39,06	10,30	11,99	0,89
GLU	110	0,72	0,50	1,33	1,39	22,50	34,72	11,60	11,96	0,77
GLN	111	0,84	0,57	1,19	1,39	15,80	30,77		11,99	0,48
THR	112	0,76	0,52	1,34	1,41	18,50	33,22	11,30	11,85	0,70
HIS	113	0,85	0,47	1,48	1,39	22,80	36,36	11,15	12,02	0,84
LEU	114	0,81	0,42	1,31	1,40	20,40	40,65	9,95	11,92	0,76
THR	115	0,85	0,54	1,39	1,43	21,20	32,26	10,20	11,68	0,78
TYR	116	1,02	0,58	1,67	1,44	24,60	30,40	11,20	11,51	0,84
ARG	117	0,73	0,58	1,45	1,44	21,10	30,40	11,40	11,52	0,77
ILE	118	0,88	0,58	1,46	1,44	22,20	30,40	9,10	11,51	0,76
GLU	119	0,85	0,56	1,43	1,42	21,00	31,35	10,10	11,75	0,82
ASN	120	0,79	0,53	1,35	1,42	19,65	32,57	10,20	11,76	0,91
TYR	121	0,73	0,51	1,36	1,39	21,60	34,13	9,60	12,02	0,95
THR	122		0,54		1,38		32,15		12,05	
PRO	123									
ASP	124	0,86	0,55	1,46	1,40	22,75	31,65	11,95	11,86	0,78
LEU	125	0,80	0,45	1,37	1,40	24,90	38,17	10,35	11,92	0,83
PRO	126									
ARG	127	0,91	0,53	1,44	1,39	22,55	32,68	12,15	12,03	0,81
ALA	128	0,91	0,58	1,52	1,38	23,30	30,49	11,20	12,12	0,71
ASP	129	0,85	0,57	1,29	1,37	25,00	30,58	10,55	12,18	0,70
VAL	130	0,88	0,53	1,39	1,39	22,00	32,68	11,00	11,98	0,82
ASP	131	0,75	0,56	1,36	1,39	29,60	31,25	11,00	12,05	0,92
HIS	132	0,83	0,58		1,37		30,40		12,20	0,72
ALA	133	0,74	0,56	1,36	1,37	25,10	31,06	11,90	12,15	0,73
ILE	134	0,70	0,54	1,35	1,39	27,70	32,05	14,50	12,03	0,67
GLU	135	0,70	0,57	1,29	1,38		30,86	15,95	12,08	0,89
LYS	136	0,96	0,58	1,37	1,37	35,60	30,40	11,70	12,21	0,67
ALA	137	0,79	0,52	1,33	1,39	24,60	33,56	15,50	12,02	0,87
PHE	138	0,73	0,55	1,43	1,39		31,45	11,10	11,98	0,96
GLN	139	0,71	0,58	1,36	1,37	28,20	30,40	10,90	12,20	0,85
LEU	140	0,77	0,56	1,31	1,38		31,25	11,50	12,11	0,80
TRP	141	0,69	0,53	1,34	1,38	26,00	32,68	10,00	12,08	0,78
SER	142	0,80	0,58	1,37	1,37	25,40	30,49	10,90	12,18	0,95
ASN	143	0,74	0,58	1,37	1,39	28,20	30,40	10,50	12,03	0,63
VAL	144	0,69	0,52	1,30	1,40	24,80	33,44	9,90	11,90	0,89
THR	145	0,78	0,57	1,39	1,40	24,35	30,58	9,40	11,88	0,77
PRO	146									
LEU	147	0,81	0,51	1,35	1,42	23,60	34,25	9,80	11,70	0,86
THR	148	0,78	0,46	1,40	1,40	23,70	37,04	9,70	11,92	0,76
PHE	149	0,83	0,48	1,41	1,41	23,55	35,97	10,35	11,78	0,67
THR	150		0,53	1,29	1,42	24,20	32,79	10,55	11,74	0,96
LYS	151	0,75	0,51	1,36	1,43	20,90	33,78	9,75	11,67	0,88
VAL	152	0,76	0,56	1,43	1,44	30,70	30,96	10,70	11,56	0,60
SER	153	0,90	0,54	1,17	1,41	20,20	32,36	13,10	11,86	0,69
GLU	154	0,77	0,58	1,40	1,42	20,90	30,40	11,60	11,71	0,50
GLY	155	0,82	0,53	1,32	1,38	18,00	32,47	11,15	12,08	0,55
GLN	156		0,43		1,39		39,68		11,99	0,77
ALA	157	0,71	0,58	1,13	1,43	13,60	30,40	7,00	11,66	0,14
ASP	158	0,63	0,57	1,42	1,44	22,90	30,67	10,85	11,57	0,82
ILE	159	0,85	0,58	1,40	1,44	24,70	30,49	10,90	11,53	0,81
MET	160	0,76	0,57	1,44	1,43	18,40	30,67	10,00	11,66	0,79
ILE	161	0,87	0,57	1,43	1,44	16,70	30,96	10,20	11,55	0,81
SER	162	0,88	0,51	1,40	1,42	24,00	33,67	11,50	11,76	0,86
PHE	163	0,75	0,51	1,26	1,42	22,75	34,13	10,50	11,75	0,84
VAL	164	0,80	0,47	1,41	1,40	24,40	36,50	11,10	11,92	0,80

ARG	165	0,77	0,42	1,15	1,40	29,00	40,65	9,70	11,92	0,61
GLY	166	0,76	0,43	1,42	1,39	19,90	39,68	11,20	11,96	0,70
ASP	167		0,58		1,40		30,40		11,89	
HIS	168	0,85	0,56	1,47	1,39	23,35	31,15	11,35	11,99	
ARG	169	0,96	0,54	1,59	1,43	21,90	32,36	11,15	11,63	0,80
ASP	170	0,76	0,56	1,33	1,40	25,70	31,35	11,30	11,88	0,75
ASN	171		0,55		1,38		31,55		12,12	
SER	172	0,77	0,53	1,39	1,42	22,70	32,89	10,80	11,71	0,76
PRO	173									
PHE	174	0,87	0,48	1,37	1,41	18,50	35,84	11,90	11,82	
ASP	175	0,73	0,52	1,48	1,41		33,33	10,90	11,82	0,76
GLY	176	0,77	0,48	1,43	1,39	25,80	35,97	12,65	11,98	0,91
PRO	177									
GLY	178	0,93	0,57		1,44	20,90	30,58		11,52	0,66
GLY	179	0,88	0,42	1,44	1,40	23,45	40,82	11,75	11,95	0,80
ASN	180	0,73	0,50	1,43	1,41	20,90	34,36	10,40	11,81	0,68
LEU	181		0,51	1,31	1,39		33,67	10,80	12,00	0,71
ALA	182	0,88	0,52	1,37	1,42	22,10	33,33	9,70	11,74	0,79
HIS	183	0,81	0,53	1,33	1,42	22,45	32,79	10,50	11,70	0,82
ALA	184	0,83	0,51	1,17	1,41		34,01	8,90	11,78	0,76
PHE	185	0,76	0,55	1,11	1,43		31,75	9,30	11,66	0,75
GLN	186	0,84	0,57	1,50	1,44	24,40	30,67	10,30	11,55	0,58
PRO	187									
GLY	188	0,88	0,58	1,37	1,43	19,30	30,40	10,25	11,61	1,06
PRO	189									
GLY	190	0,69	0,52	1,17	1,41	21,60	33,33	9,50	11,78	1,05
ILE	191		0,49	1,65	1,42		35,09	12,05	11,71	
GLY	192	0,89	0,44	1,45	1,39	24,40	38,76	11,45	12,02	0,98
GLY	193	0,82	0,56	1,43	1,44	26,45	31,45	11,00	11,59	0,97
ASP	194	0,84	0,51	1,50	1,42	23,25	34,13	11,70	11,76	0,75
ALA	195		0,55	1,30	1,43		31,85	12,70	11,61	0,89
HIS	196	0,87	0,54	1,31	1,42	22,85	32,05	11,00	11,75	0,87
PHE	197	0,87	0,49	1,34	1,42	24,85	35,09	10,90	11,75	0,95
ASP	198	0,77	0,47	1,39	1,40	21,60	36,36	11,25	11,93	0,87
GLU	199	0,69	0,47	1,44	1,42	20,65	36,63	12,00	11,78	0,94
ASP	200	0,88	0,55	1,48	1,40	25,90	31,45	12,00	11,90	0,80
GLU	201	0,84	0,47	1,49	1,38	26,10	36,50	11,55	12,06	0,86
ARG	202	0,84	0,50	1,43	1,41	18,00	34,84	11,45	11,78	0,90
TRP	203	0,82	0,43	1,34	1,40	23,00	40,00	11,00	11,89	0,81
THR	204	0,86	0,57	1,35	1,39	20,75	30,77	10,25	12,00	0,83
ASN	205	0,65	0,56	1,43	1,37	24,20	31,35	11,45	12,22	0,79
ASN	206		0,53	1,43	1,42	30,50	32,57	11,10	11,70	0,78
PHE	207	0,85	0,55	1,27	1,40		31,95	11,50	11,89	
ARG	208	0,83	0,58	1,53	1,43	22,45	30,40	10,80	11,61	
GLU	209	0,92	0,43	1,47	1,40	21,45	39,53	10,65	11,89	0,65
TYR	210	0,75	0,45	1,42	1,40	22,55	37,88	10,60	11,93	0,71
ASN	211		0,48	1,43	1,41	23,60	36,23	11,60	11,85	0,79
LEU	212	0,75	0,58	1,40	1,38	18,60	30,40	10,80	12,08	0,70
HIS	213	0,76	0,55	1,36	1,39	26,10	31,95	13,20	12,03	0,77
ARG	214	0,81	0,56	1,43	1,37	25,15	31,25	11,75	12,17	0,85
VAL	215	0,79	0,58	1,35	1,38	26,40	30,49	12,80	12,11	0,74
ALA	216	0,83	0,56	1,40	1,40	24,30	31,35	11,70	11,95	0,87
ALA	217	0,81	0,52	1,21	1,38	22,25	33,00	9,35	12,14	
HIS	218	0,77	0,57	1,29	1,37	24,65	30,86	11,50	12,21	0,67
ALA	219	0,92	0,56	1,35	1,38	25,00	30,96	11,60	12,05	0,82
LEU	220	0,81	0,53	1,43	1,39	21,80	32,89	10,35	11,99	0,85
GLY	221	0,71	0,53	1,38	1,37	23,30	32,47	11,40	12,20	0,88
HIS	222	0,81	0,55	1,40	1,37	24,15	31,75	11,30	12,21	0,78
SER	223		0,51	1,41	1,39	31,40	34,13	11,45	12,02	0,86
LEU	224	0,64	0,46	1,39	1,39	22,15	37,45	10,75	12,02	0,84
GLY	225	0,86	0,58	1,45	1,37	21,10	30,49	11,30	12,21	0,55
LEU	226	0,61	0,57		1,41		30,67	13,15	11,79	0,77
SER	227	0,69	0,54	1,49	1,38	23,90	32,36	9,45	12,09	0,74
HIS	228		0,52		1,43		33,44		11,66	0,84
SER	229	0,71	0,58	1,36	1,40	18,10	30,40	10,30	11,92	0,71
THR	230	0,82	0,58	1,45	1,37	24,30	30,40	10,80	12,21	0,73
ASP	231	0,85	0,44	1,41	1,40	23,50	38,76	10,70	11,89	0,72
ILE	232	0,82	0,51		1,41	25,55	33,78		11,79	0,72
GLY	233	0,96	0,57	1,46	1,38	24,90	30,58	12,30	12,08	0,76
ALA	234	0,98	0,57	1,44	1,44		30,58	10,70	11,53	0,82

LEU	235		0,58		1,39		30,40		11,95	0,68
MET	236		0,55	1,32	1,38		31,75	10,25	12,05	
TYR	237	0,86	0,53	1,54	1,43	25,30	32,89	10,80	11,63	0,91
PRO	238									
SER	239	0,60	0,55	1,21	1,42	21,00	31,75	9,50	11,71	0,61
TYR	240	0,53	0,51		1,41		33,78		11,78	0,84
THR	241	0,93	0,53	1,53	1,38	24,70	32,68	13,30	12,11	0,59
PHE	242		0,49		1,39		35,21		11,96	
SER	243		0,51		1,38		34,25		12,14	
GLY	244		0,56		1,42		31,06	7,55	11,74	0,88
ASP	245	1,32	0,58	1,32	1,44	12,80	30,40	8,50	11,51	0,40
VAL	246	0,97	0,54	1,31	1,40	16,30	32,05	10,00	11,90	0,39
GLN	247	0,89	0,57	1,25	1,44		30,86	9,90	11,59	0,73
LEU	248	0,65	0,57	1,35	1,44	23,85	30,58	9,95	11,56	1,04
ALA	249	0,68	0,51	1,39	1,42	22,50	34,13	10,20	11,75	0,49
GLN	250		0,43	1,65	1,39		39,37	11,00	12,00	0,49
ASP	251	0,89	0,49	1,53	1,38	22,90	35,21	11,50	12,12	0,84
ASP	252	0,73	0,48	1,41	1,39	20,90	35,59	10,15	12,02	0,72
ILE	253		0,43	1,33	1,39		39,53	11,20	11,99	0,60
ASP	254	0,79	0,46	1,37	1,39	24,90	37,59	11,20	12,05	0,63
GLY	255	0,75	0,50	1,41	1,38	20,30	34,36	10,30	12,14	0,91
ILE	256	0,84	0,47	1,52	1,39	26,50	36,50	12,05	12,02	0,91
GLN	257	0,88	0,44	1,37	1,39	26,20	38,91	10,95	12,00	0,88
ALA	258		0,53	1,38	1,37		32,89	10,80	12,14	0,63
ILE	259	0,78	0,53	1,27	1,38	24,10	32,79	9,50	12,05	0,72
TYR	260	0,81	0,44	1,21	1,39	20,00	38,76	8,65	12,02	0,81
GLY	261	0,79	0,55	1,17	1,43		31,65	6,10	11,64	0,85
ARG	262	0,81	0,58			19,45	30,40			0,67
SER	263	0,94	0,46			19,75	37,45			0,45
GLN	264		0,54				32,47			
ASN	265		0,58				30,40			
PRO	266									
VAL	267	0,98	0,53				33,00			0,37
GLN	268	1,09	0,49				35,34			0,39
PRO	269									
ILE	270	1,13	0,55			11,90	31,45			0,30
GLY	271	1,08	0,58		1,12	12,10	30,49		15,04	0,34
PRO	272									
GLN	273		0,47		1,06		36,63		15,87	
THR	274		0,47		1,06		36,76		15,90	
PRO	275									
LYS	276		0,54	1,21	1,10		32,05	16,83	15,24	
ALA	277	0,74	0,49	1,21	1,08	28,80	35,34	17,80	15,65	0,95
CYS	278	0,72	0,42	1,06	1,08	27,00	40,65	19,90	15,70	0,91
ASP	279	0,68	0,57	1,15	1,10	22,55	30,58	17,00	15,38	0,57
SER	280		0,54		1,07		32,26		15,72	
LYS	281		0,45		1,06		37,88		15,87	
LEU	282	0,72	0,58	1,09	1,08	23,00	30,40	16,84	15,65	0,84
THR	283	0,75	0,43	1,07	1,08	33,20	39,84	16,04	15,60	0,90
PHE	284	0,63	0,44	1,11	1,08	20,35	38,61	17,49	15,70	0,57
ASP	285		0,49	1,03	1,07		35,34	18,60	15,75	
ALA	286	0,77	0,51	1,03	1,05	35,00	34,01	20,20	16,05	0,78
ILE	287	0,58	0,49	0,96	1,05	28,20	35,46	18,59	16,05	0,99
THR	288		0,47	1,05	1,05		36,50	20,62	16,05	0,86
THR	289	0,72	0,49	0,99	1,05	26,50	35,09	21,05	16,05	0,81
ILE	290	0,73	0,58	0,99	1,07	31,70	30,40	18,78	15,77	0,70
ARG	291	0,67	0,53	1,06	1,05	24,20	32,68	18,10	16,03	0,58
GLY	292	0,80	0,52	1,13	1,06	23,70	33,44	18,44	15,92	0,73
GLU	293		0,57	1,07	1,08		30,67	18,52	15,58	0,64
VAL	294	0,81	0,54	1,05	1,05	26,80	32,05	16,93	16,00	0,57
MET	295		0,48	1,02	1,05	22,65	35,84	16,93	16,05	
PHE	296		0,55	0,99	1,06	39,30	31,85	17,92	15,90	0,80
PHE	297		0,45	1,03	1,07	35,00	38,46	19,62	15,77	0,90
LYS	298		0,51	1,04	1,09	35,60	34,13	18,34	15,38	0,71
ASP	299	0,55	0,46	1,05	1,06	26,00	37,04	17,38	15,92	0,40
ARG	300	0,54	0,54	1,06	1,09	20,20	32,36	19,50	15,41	0,65
PHE	301		0,56	1,19	1,12		30,96	18,33	15,06	
TYR	302	0,59	0,47	1,07	1,06	31,25	36,36	18,63	15,95	0,87
MET	303		0,47	0,98	1,05		36,36	21,07	16,00	0,72
ARG	304	0,72	0,44	1,00	1,06		39,06	20,56	15,95	0,95
THR	305	0,67	0,52	1,11	1,05	30,15	33,44	19,11	16,05	0,99
ASN	306	0,90	0,47	1,16	1,05	22,50	36,36	16,18	16,05	0,59
PRO	307									
PHE	308	0,99	0,57	1,27	1,09	18,15	30,58	14,13	15,55	0,60

TYR	309	0,85	0,58	1,19	1,08	21,65	30,49	14,15	15,63	0,67
PRO	310									
GLU	311	0,93	0,54	1,29	1,05		32,26	11,16	16,00	0,34
VAL	312	0,96	0,56	1,29	1,07	16,60	31,35	15,32	15,72	0,63
GLU	313	0,58	0,45	1,09	1,05	17,70	37,88	15,32	16,00	0,50
LEU	314	0,67	0,50	1,03	1,06	27,35	34,36	17,72	15,97	0,96
ASN	315	0,68	0,46	1,03	1,06		37,17	16,72	15,85	
PHE	316	0,56	0,46	1,00	1,07	29,75	37,31	17,45	15,82	
ILE	317		0,58	0,89	1,13		30,40	19,31	14,90	0,65
SER	318	0,66	0,56	1,16	1,12	27,30	31,35	18,16	15,08	0,80
VAL	319	0,68	0,56	1,10	1,11	27,55	31,25	19,18	15,24	0,97
PHE	320	0,68	0,57	1,04	1,12		30,77	16,85	15,02	
TRP	321	0,75	0,58	0,96	1,10	25,90	30,49	17,03	15,27	1,03
PRO	322									
GLN	323	0,91	0,54	1,07	1,12	18,80	32,05	17,30	14,97	0,76
LEU	324	0,63	0,58	1,05	1,11	32,20	30,49	19,29	15,11	0,74
PRO	325									
ASN	326	0,70	0,44	1,02	1,09	23,40	38,76	15,52	15,55	0,79
GLY	327	0,91	0,58	1,16	1,10	20,70	30,40	16,72	15,29	0,78
LEU	328	0,77	0,54	1,02	1,06	22,40	32,36	16,74	15,92	0,79
GLU	329	0,75	0,58		1,10		30,49		15,38	0,97
ALA	330		0,51	1,02	1,09		33,90	18,04	15,46	0,81
ALA	331	0,60	0,48	1,03	1,09	23,60	35,84	17,18	15,50	0,95
TYR	332	0,73	0,54	1,06	1,09	23,00	32,36	20,08	15,48	0,65
GLU	333	0,72	0,54	1,02	1,09	21,50	32,36	18,04	15,48	0,51
PHE	334	0,53	0,44	1,02	1,08		38,91	17,00	15,67	0,97
ALA	335	0,79	0,57	1,19	1,10	24,70	30,86	19,17	15,31	0,59
ASP	336	0,76	0,57	1,20	1,12	32,60	30,58	20,48	14,99	
ARG	337	0,71	0,58	1,02	1,12	23,65	30,40	15,96	14,99	
ASP	338		0,45	1,06	1,08	24,20	37,74	18,28	15,58	0,61
GLU	339	0,69	0,42	1,04	1,06	30,60	40,32	18,12	15,85	0,75
VAL	340	0,76	0,50	1,08	1,09	31,40	34,72	17,28	15,48	0,65
ARG	341	0,71	0,47	1,05	1,09	23,75	36,63	16,12	15,50	0,81
PHE	342	0,73	0,55	1,04	1,09	31,25	31,65	18,44	15,41	0,68
PHE	343		0,58	0,95	1,08		30,49	20,43	15,65	0,66
LYS	344	0,61	0,56	0,99	1,07	28,80	31,06	18,02	15,75	0,86
GLY	345	0,75	0,58	1,18	1,08		30,49	16,52	15,58	
ASN	346		0,47	1,06	1,09	38,90	36,76	18,21	15,53	0,83
LYS	347	0,89	0,48	1,04	1,07	21,25	35,59	18,74	15,72	0,78
TYR	348	0,69	0,58	1,11	1,08	30,65	30,49	17,58	15,63	0,70
TRP	349		0,57	1,05	1,10	25,60	30,67	17,86	15,38	0,54
ALA	350		0,53		1,09		32,57		15,50	
VAL	351	0,89	0,45	1,11	1,09	38,10	38,17	19,87	15,55	0,64
GLN	352	0,89	0,45	1,09	1,09	28,00	38,17	17,07	15,50	0,77
GLY	353	0,82	0,44	1,16	1,08	20,10	38,76	19,46	15,55	0,74
GLN	354	0,99	0,57	1,29	1,11		30,58		15,15	0,88
ASN	355	0,77	0,43	1,08	1,09	27,20	39,68	17,07	15,53	0,62
VAL	356	0,69	0,43	1,07	1,08	20,80	39,68	17,36	15,65	0,88
LEU	357	0,73	0,52	1,04	1,09	23,55	33,22	18,06	15,46	0,79
HIS	358	0,98	0,56	1,18	1,13	27,05	31,35	17,73	14,95	0,83
GLY	359		0,44		1,08		39,22		15,65	
TYR	360	0,63	0,56	0,98	1,13	23,50	31,45	18,72	14,97	0,80
PRO	361									
LYS	362		0,58		1,09		30,40		15,48	
ASP	363	0,79	0,58	1,03	1,08	28,40	30,40	17,58	15,55	0,76
ILE	364		0,52	1,13	1,12	27,50	33,11	18,14	15,04	0,92
TYR	365	0,69	0,45	1,10	1,10	23,35	37,74	18,70	15,36	0,96
SER	366		0,43	1,16	1,08		39,37	16,00	15,60	
SER	367		0,54		1,11		32,36		15,13	
PHE	368		0,52	1,10	1,12		33,11	18,97	15,04	0,79
GLY	369	0,59	0,43	0,97	1,08	25,20	39,53	22,54	15,60	0,74
PHE	370	0,58	0,46	1,03	1,09	28,60	37,17	19,29	15,53	0,99
PRO	371									
ARG	372		0,54	1,06	1,06		32,26		15,90	
THR	373	0,72	0,45	1,20	1,09	30,70	38,02	19,50	15,43	0,48
VAL	374	0,59	0,51	1,10	1,09	20,75	33,67	18,43	15,41	0,90
LYS	375		0,55		1,11		31,55		15,22	
HIS	376	0,68	0,53	1,06	1,10	23,00	32,89	18,23	15,29	0,89
ILE	377		0,42	0,99	1,06		40,16		15,90	
ASP	378		0,43	1,02	1,06		39,68	19,12	15,92	0,75
ALA	379		0,52	1,06	1,05	33,05	33,56	22,42	16,05	0,78
ALA	380		0,50	0,96	1,05	24,70	34,72	21,58	16,03	0,85
LEU	381		0,50	0,95	1,06	26,90	34,48	20,86	15,95	0,98
SER	382		0,54	1,07	1,06		31,95	20,93	15,97	0,74
GLU	383	0,71	0,56	1,01	1,06	26,10	31,35	19,38	15,87	
GLU	384	0,81	0,58	1,16	1,10	21,00	30,40	17,18	15,31	0,53

ASN	385	0,78	0,52	1,12	1,10	22,10	33,11	23,24	15,31	0,87
THR	386	0,80	0,44	1,04	1,09	22,30	39,22	15,89	15,48	0,67
GLY	387	0,74	0,51	1,09	1,05	25,85	34,01	19,04	16,05	0,50
LYS	388	0,71	0,55	1,11	1,09	26,55	31,75	18,07	15,46	0,74
THR	389	0,67	0,56	0,96	1,06	27,30	31,25	20,95	15,95	0,80
TYR	390	0,67	0,57	1,09	1,07	29,70	30,96	20,20	15,75	0,78
PHE	391		0,47	0,94	1,05		36,36	20,28	16,05	
PHE	392		0,45		1,07		37,74		15,77	
VAL	393	0,52	0,42	1,05	1,07	41,70	40,82	16,60	15,77	0,85
ALA	394	0,92	0,43	1,04	1,08		40,00	18,61	15,67	0,86
ASN	395	0,77	0,58	1,04	1,08	30,70	30,40	18,20	15,58	0,54
LYS	396		0,44		1,08		39,06		15,55	
TYR	397		0,44		1,06		38,76		15,90	
TRP	398		0,48		1,06		35,71		15,97	
ARG	399		0,52		1,06		33,33		15,95	
TYR	400	0,64	0,56	0,94	1,06		31,06	19,68	15,90	
ASP	401	0,57	0,57	0,99	1,07	21,40	30,67	16,87	15,77	0,76
GLU	402	0,92	0,57	1,00	1,08	30,10	30,86	23,41	15,63	0,95
TYR	403	0,74	0,56	1,05	1,09	34,00	31,45	19,86	15,50	0,73
LYS	404	1,19	0,48	0,98	1,08	42,65	36,23	17,31	15,60	0,82
ARG	405	0,83	0,57	1,00	1,08	26,15	30,77	17,80	15,55	0,64
SER	406	0,68	0,57	1,04	1,09	29,45	30,77	18,44	15,48	0,88
MET	407	0,62	0,55	1,14	1,10		31,75	20,41	15,38	
ASP	408		0,54	1,07	1,12		32,26	22,18	15,08	
PRO	409									
GLY	410	0,66	0,58	1,04	1,08	24,50	30,49	15,53	15,67	1,05
TYR	411		0,51	0,97	1,09	23,50	33,67	16,10	15,48	
PRO	412									
LYS	413		0,57		1,12		30,86		15,06	
MET	414		0,42	1,01	1,08		40,82	15,94	15,67	
ILE	415		0,53	1,06	1,12		32,79	18,16	15,04	
ALA	416	0,72	0,52	1,02	1,11	24,10	33,56	18,62	15,22	0,87
HIS	417		0,53	1,02	1,09		32,79	17,06	15,50	0,68
ASP	418		0,48	1,04	1,09		35,71	17,15	15,41	0,68
PHE	419		0,57		1,12		30,67		15,02	
PRO	420									
GLY	421		0,58		1,11		30,40		15,22	
ILE	422		0,50	1,18	1,08		34,36	19,45	15,67	0,80
GLY	423	0,69	0,42	1,10	1,08	22,90	40,49	17,31	15,63	0,63
HIS	424		0,50	1,02	1,09		34,72	18,91	15,50	
LYS	425	0,72	0,57	1,13	1,09	25,00	30,96	19,00	15,50	0,77
VAL	426	0,74	0,58	0,99	1,07	22,60	30,49	18,67	15,82	
ASP	427		0,55	1,10	1,09		31,85	18,70	15,53	0,68
ALA	428		0,50	1,03	1,09		34,60	21,71	15,46	0,58
VAL	429	0,77	0,52	1,08	1,09	32,80	33,44	19,69	15,41	0,79
PHE	430	0,72	0,55	1,05	1,09		31,65	22,71	15,46	0,58
MET	431	0,73	0,54	1,11	1,10	25,45	32,36	20,33	15,36	0,69
LYS	432	0,67	0,49	1,05	1,09	29,00	35,21	18,63	15,46	
ASP	433		0,52		1,10		33,56		15,34	
GLY	434	0,74	0,50	1,12	1,09	26,00	34,60	14,49	15,48	0,66
PHE	435	0,82	0,49	1,08	1,07	33,05	35,09	18,18	15,75	0,82
PHE	436		0,46	1,02	1,08	33,55	37,45	19,29	15,58	0,81
TYR	437		0,55	1,00	1,10	25,00	31,55	17,33	15,36	0,61
PHE	438	0,62	0,49	1,05	1,09	25,45	35,21	17,55	15,48	0,94
PHE	439	0,70	0,58	0,98	1,07	24,40	30,40	18,52	15,72	
HIS	440	0,68	0,58	0,96	1,07	26,75	30,40	18,14	15,77	0,83
GLY	441	0,69	0,57	1,06	1,08	26,70	30,96	19,36	15,58	0,76
THR	442		0,58	1,16	1,13	24,65	30,40	19,82	14,90	0,81
ARG	443	0,72	0,57	1,14	1,09	28,90	30,58	18,46	15,48	0,84
GLN	444		0,57		1,09		30,96		15,53	
TYR	445	0,56	0,56	1,02	1,08	19,45	31,15	19,38	15,58	
LYS	446		0,58	1,09	1,09		30,49	18,49	15,50	
PHE	447	0,53	0,48	1,11	1,09	26,00	35,59	22,17	15,50	0,71
ASP	448	0,56	0,55	1,08	1,11	25,80	31,45	17,73	15,15	0,99
PRO	449									
LYS	450		0,51	0,92	1,07		33,90	20,02	15,77	0,85
THR	451	0,58	0,48	0,96	1,06	26,60	36,10	16,10	15,92	0,80
LYS	452		0,57	1,05	1,12		30,67	18,58	15,08	0,79
ARG	453	0,71	0,57	1,02	1,12	21,25	30,58	15,81	14,97	0,56
ILE	454	0,75	0,51	1,04	1,10	23,50	33,67	15,62	15,34	0,71
LEU	455		0,54	1,04	1,09		32,36	16,25	15,43	
THR	456	0,75	0,58	1,05	1,08	26,80	30,49	25,00	15,60	0,88
LEU	457	0,93	0,58	1,17	1,07	21,70	30,49	17,05	15,70	
GLN	458	0,72	0,58	1,08	1,07	25,25	30,49	19,49	15,72	0,93
LYS	459	0,85	0,58	1,22	1,09	24,40	30,40	20,40	15,48	0,98
ALA	460	1,00	0,57	1,23	1,13	26,55	30,77	20,65	14,88	0,86

ASN	461	0,92	0,58	1,18	1,12		30,40	18,70	15,08	0,73
SER	462	0,65	0,53	1,12	1,07	28,00	32,57	19,41	15,75	0,78
TRP	463	0,97	0,58	1,28	1,09	24,45	30,49	18,51	15,48	0,76
PHE	464	0,75	0,58	1,11	1,11	25,30	30,40	18,13	15,11	0,70
ASN	465	0,88	0,54	1,12	1,10	25,50	32,26	21,92	15,31	1,05
CYS	466		0,42	1,19	1,07		40,65	17,26	15,72	0,61
ARG	467									
LYS	468	0,98								0,75
ASN	469	1,11		1,19				5,72		-0,69

Table S5. List of residues with a relaxation rate difference ($R_{1\text{para}} - R_{1\text{dia}}$), for the backbone NH protons, higher than 0.7 s^{-1} , in presence of Gd(DTPA-MA) 1.4 mM (pH 7.2, 306K).

Residue	Number	Residue	Number
THR	112	ASN	355
HIS	113	LEU	357
ASP	124	ASP	363
LEU	125	SER	366
ALA	128	GLY	369
GLU	135	THR	373
PHE	138	VAL	374
LYS	151	HIS	376
GLU	154	ILE	377
GLY	155	GLU	383
ALA	157	ASN	385
ASP	158	THR	386
GLY	166	GLY	387
HIS	168	LYS	388
ARG	169	THR	389
ASP	170	TYR	390
SER	172	TYR	403
PHE	174	LYS	404
GLY	176	ARG	405
ASN	180	SER	406
GLY	192	GLY	410
HIS	200	TYR	411
ARG	202	ILE	415
ASN	205	ALA	416
ASN	206	GLY	423
ARG	208	LYS	425
GLU	209	GLY	434
HIS	213	GLY	441
SER	227	THR	442
SER	229	ARG	443
THR	230	GLN	444
ASP	231	LYS	446
GLY	233	THR	451
THR	241	LEU	455
ASP	245	LEU	457
VAL	246	GLN	458
GLN	247	SER	462
ASP	251	ASN	469
ILE	253		
ALA	258		
GLN	268		
ILE	270		
GLY	271		
LYS	276		
ALA	277		
ASP	279		
LEU	282		
GLY	292		
VAL	294		
ASP	299		
ASN	306		
PHE	308		
TYR	309		
GLU	311		
VAL	312		
GLU	313		
LEU	314		
ARG	337		
ASP	338		

GLY	345
GLY	353
GLN	354