

Supplementary Table I: DR0901 Preference and Pocket 6 Array

P1 Residue	Value	P4 Residue	Value	P6 Residue	Value	Charge	P7 Residue	Value	P9 Residue	"-1" Value	"0" Value	"1" Value	"0.5" Value
G	0.00	G	2.31	G	0.80	0	G	0.50	G	0.05	1.00	0.03	0.04
A	0.05	A	1.32	A	1.59	0	A	1.35	A	0.09	1.08	0.04	0.06
V	0.16	V	0.75	V	0.80	0	V	1.80	V	0.35	0.90	0.13	0.24
L	0.16	L	0.02	L	0.65	0.5	L	2.20	L	0.25	0.69	0.13	0.19
I	0.20	I	0.02	I	0.65	0	I	2.50	I	1.00	1.00	1.00	1.00
M	0.12	M	0.50	M	0.94	0.5	M	3.66	M	0.29	0.96	0.34	0.32
P	0.00	P	0.25	P	1.39	0.5	P	2.47	P	0.05	0.53	0.05	0.05
F	1.00	F	0.25	F	0.65	0.5	F	3.11	F	0.25	0.85	0.15	0.20
W	0.62	W	0.02	W	0.55	0.5	W	2.80	W	0.16	0.85	0.15	0.16
S	0.00	S	1.00	S	1.41	0	S	0.77	S	0.11	0.63	0.02	0.11
T	0.00	T	0.40	T	1.17	0	T	1.50	T	0.13	0.60	0.04	0.09
N	0.00	N	0.15	N	0.88	0	N	3.26	N	0.04	0.60	0.05	0.05
Q	0.00	Q	0.06	Q	0.70	0.5	Q	2.80	Q	0.03	0.60	0.06	0.05
Y	0.65	Y	0.02	Y	0.65	0.5	Y	2.14	Y	0.34	0.92	0.15	0.24
C	0.00	C	0.13	C	0.50	0	C	0.70	C	0.04	0.50	0.02	0.03
K	0.00	K	0.07	K	0.60	1	K	1.00	K	0.02	0.70	0.01	0.02
R	0.00	R	0.06	R	0.61	1	R	1.66	R	0.01	0.60	0.01	0.01
H	0.00	H	0.87	H	0.94	1	H	2.97	H	0.15	0.53	0.03	0.09
D	0.00	D	0.04	D	1.00	-1	D	0.50	D	0.14	1.26	0.04	0.09
E	0.00	E	0.01	E	0.88	-1	E	0.40	E	0.10	0.55	0.02	0.06