

Table S2. Interaction energies (kcal/mol; Van der Waals: E_{VdW} , Coulomb: E_{Coul} , Hydrogen Bonding: E_{HB} , Total: E_{int}) of proximal, intermediate and distal poses of SKI II with main interacting residues of CB5R.

Pose	Residue	E_{VdW}	E_{Coul}	E_{HB}	E_{int}
Proximal	T181	-3,35	-1,01	0,00	-4,36
	G274	-3,92	-1,76	-0,15	-5,82
	P275	-4,00	0,18	0,00	-3,81
	F300	-1,03	-6,60	-0,15	-7,78
	FAD	-8,15	-2,05	0,00	-10,20
Intermediate	G179	-2,59	-2,00	-0,31	-4,90
	Q210	-3,90	-1,21	-0,04	-5,15
	P275	-3,62	-0,05	0,00	-3,67
	FAD	-3,62	-1,83	0,00	-5,46
Distal	Q210	-1,66	-2,86	-0,03	-4,82
	F251	-7,26	0,90	0,00	-6,36
	P277	-3,97	-0,26	0,00	-4,23
	M278	-3,91	-0,34	0,00	-4,25
	F281	-4,88	0,12	0,00	-4,76