a)CYP81AA2 rigid receptor, all 25 docking results

Global docking result analysis

==========

25 VINA docking runs of the ligand object 2 to the receptor object 1 yielded the following results,
sorted by binding energy [more positive energies indicate stronger binding, and negative energies mean no binding]

Run	Bind.energy[kcal/mol]	Dissoc. constant [pM]	Contacting receptor residues
001	000007.9230	00000001557270.2500	PHE 116 ILE 218 VAL 219 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 SER 375 LEU 378 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
002	000007.9230	00000001557270.2500	PHE 116 ILE 218 VAL 219 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 SER 375 LEU 378 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
003	000007.7130	00000002219709.0000	VAL 115 PHE 116 ILE 218 VAL 219 MET 306 ALA 310 THR 314 SER 375 LEU 378 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
004	000007.7130	00000002219709.0000	VAL 115 PHE 116 ILE 218 VAL 219 MET 306 ALA 310 THR 314 SER 375 LEU 378 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
005	000007.5570	00000002888321.7500	PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 MET 486 HEM A 600
006	000007.5570	00000002888321.7500	PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 MET 486 HEM A 600
007	000007.5200	00000003074446.2500	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ILE 309 GLU 313 THR 314 ALA 317 PRO 374 SER 375 LEU 379 SER 485 MET 486
008	000007.5200	00000003074446.2500	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ILE 309 GLU 313 THR 314 ALA 317 PRO 374 SER 375 LEU 379 SER 485 MET 486
009	000007.3530	00000004075487.2500	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
010	000007.3530	00000004075487.2500	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
011	000007.3310	00000004229663.0000	LEU 107 PHE 113 VAL 115 PHE 116 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309 THR 314 SER 375 LEU 379 SER 485
012	000007.1980	00000005294147.5000	VAL 115 PHE 116 ILE 218 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 SER 375 LEU 379 CYS 445 HEM A 600
013	000007.1790	00000005466674.5000	LEU 107 PHE 113 VAL 115 PHE 116 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ARG 249 MET 306 ILE 309 GLU 313 THR 314 SER 375 LEU 379 SER 485
014	000007.0950	00000006299354.5000	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ILE 309 GLU 313 THR 314 ALA 317 PRO 374 SER 375 LEU 379 SER 485 MET 486
015	000007.0760	00000006504639.5000	LEU 51 TYR 52 SER 375 PRO 376 LEU 377 LEU 378 LEU 379 PRO 380 MET 399 LEU 401 GLY 482 ALA 483 ALA 484 MET 486
016	000007.0360	00000006958948.5000	LEU 107 THR 108 PHE 113 VAL 115 PHE 116 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 GLU 313 THR 314 LEU 379
017	000007.0260	00000007077399.5000	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
018	000006.8570	00000009413527.0000	PHE 116 PHE 215 ILE 218 ILE 309 GLU 313 THR 314 SER 375 LEU 378 LEU 379 PRO 380 SER 485

```
019 |         000006.8020 | 00000010329229.0000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR
314 SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 SER   485
020 |         000006.6950 | 00000012373710.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 GLU
313 THR   314 LEU   379 CYS   445 HEM A 600
021 |         000006.6820 | 00000012648210.0000 | ILE   46 LEU   51 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378 PRO
380 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
022 |         000006.6490 | 00000013372678.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 THR   314 PRO
374 SER   375 LEU   379 SER   485 HEM A 600
023 |         000006.6480 | 00000013395267.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314 SER
375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 SER   485
024 |         000006.5540 | 00000015698361.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 VAL   219 MET   306 ILE   309 ALA
310 GLU   313 THR   314 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
025 |         000006.4300 | 00000019352964.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314 PRO
374 SER   375 LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486

After clustering the 25 runs, the following 7 distinct complex conformations were found:
[They all differ by at least 5.0 A heavy atom RMSD]

Clu |Bind.energy[kcal/mol]|Dissoc. constant [pM]| Contacting receptor residues

----+--------------------+--------------------+----------------------------

001 |         000007.9230 | 00000001557270.2500 | PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 SER
375 LEU   378 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600

002 |         000007.7130 | 00000002219709.0000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ALA   310 THR   314 SER
375 LEU   378 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600

003 |         000007.5200 | 00000003074446.2500 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313 THR
314 ALA   317 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486

004 |         000007.3310 | 00000004229663.0000 | LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ARG
249 THR   305 MET   306 ILE   309 THR   314 SER   375 LEU   379 SER   485

005 |         000007.0760 | 00000006504639.5000 | LEU   51 TYR   52 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO
380 MET   399 LEU   401 GLY   482 ALA   483 ALA   484 MET   486

006 |         000007.0360 | 00000006958948.5000 | LEU   107 THR   108 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE
218 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314 LEU   379

007 |         000006.6820 | 00000012648210.0000 | ILE   46 LEU   51 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378 PRO
380 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
```

b) CYP81AA2 flexible receptor sidechains, all 100 docking results

Ensemble docking result analysis
==========

The ligand was docked 20 times ["Run"] with VINA against each of the 5 receptors ["Rec"] in the ensemble, yielding the following 100 results, sorted by binding energy:
[More positive energies indicate stronger binding, and negative energies mean no binding]

Rec	Run	Bind.energy[kcal/mol]	Dissoc. constant [pM]	Contacting receptor residues
002	001	000008.2560	00000000887711.3125	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 MET 486 HEM A 600
005	001	000008.2050	00000000967509.5625	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 ILE 309 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 MET 486 HEM A 600
003	001	000008.0680	00000001219207.3750	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 MET 486 HEM A 600
004	001	000007.9640	00000001453150.5000	PHE 215 ILE 218 ILE 309 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 CYS 445 ALA 484 SER 485 MET 486 HEM A 600
005	002	000007.9390	00000001515778.8750	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ILE 309 GLU 313 THR 314 ALA 317 PRO 374 SER 375 LEU 379 SER 485
001	001	000007.9190	00000001567819.3750	VAL 115 PHE 116 ILE 218 VAL 219 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 SER 375 LEU 378 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
005	003	000007.8210	00000001849826.5000	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 VAL 219 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 SER 375 LEU 378 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
004	002	000007.8170	00000001862357.3750	VAL 115 PHE 116 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 HEM A 600
005	004	000007.7460	00000002099455.7500	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 ALA 484 SER 485 HEM A 600
001	002	000007.7200	00000002193638.0000	VAL 115 PHE 116 ILE 218 VAL 219 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 378 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
003	002	000007.7140	00000002215965.7500	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
002	002	000007.6980	00000002276623.2500	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
004	003	000007.6310	00000002549193.7500	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
005	005	000007.6150	00000002618972.7500	VAL 115 PHE 116 ILE 218 VAL 219 MET 306 ALA 310 SER 375 LEU 378 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 HEM A 600
001	003	000007.5550	00000002898088.0000	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 CYS 445 ALA 484 SER 485 MET 486 HEM A 600
004	004	000007.5550	00000002898088.0000	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 SER 375 LEU 379 SER 485 HEM A 600
001	004	000007.5170	00000003090053.0000	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 MET 306 ILE 309 GLU 313 THR 314 ALA 317 PRO 374 SER 375 LEU 379 SER 485 MET 486

```
003 | 003 |         000007.5090 | 00000003132059.5000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ALA   310 SER   375
LEU   378 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
002 | 003 |         000007.5070 | 00000003142650.2500 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ALA   310 SER   375
LEU   378 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
004 | 005 |         000007.4550 | 00000003430935.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 ALA   317 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486
005 | 006 |         000007.3220 | 00000004294403.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 ALA   317 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486
003 | 004 |         000007.2830 | 00000004586593.0000 | PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 SER   375
LEU   378 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
002 | 004 |         000007.2450 | 00000004890402.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 SER   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
003 | 005 |         000007.2120 | 00000005170516.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 SER   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
001 | 005 |         000007.1980 | 00000005294147.5000 | LEU   107 VAL   115 PHE   116 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
THR   314 SER   375 LEU   379 CYS   445 HEM A 600
004 | 006 |         000007.1920 | 00000005348033.5000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 MET   306 ALA   310 SER   375 LEU   378
LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
004 | 007 |         000007.1850 | 00000005411593.5000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ALA   310 THR   314
SER   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
002 | 005 |         000007.1480 | 00000005760319.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 VAL   219 MET   306 ALA   310
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
003 | 006 |         000007.1460 | 00000005779796.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 SER   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
004 | 008 |         000007.1300 | 00000005938007.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 THR   314 PRO   374
SER   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 MET   486 HEM A 600
005 | 007 |         000007.1120 | 00000006121176.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 HEM A 600
003 | 007 |         000007.1090 | 00000006152249.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 ALA   317 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485
005 | 008 |         000007.0970 | 00000006278126.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 HEM A 600
004 | 009 |         000007.0630 | 00000006648939.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 SER   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
004 | 010 |         000007.0520 | 00000006773536.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486 HEM A 600
005 | 009 |         000007.0450 | 00000006854038.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486
002 | 006 |         000007.0430 | 00000006877214.0000 | LEU   51 TYR   52 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378
LEU   379 PRO   380 LEU   401 GLY   482 ALA   483 ALA   484 MET   486
002 | 007 |         000007.0400 | 00000006912125.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 SER   375 LEU   379 SER   485 HEM A 600
005 | 010 |         000007.0320 | 00000007006089.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 ALA   310 THR   314 PRO   374
SER   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
```

```
003 | 008 |         000006.9770 | 00000007687607.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
GLU   313 THR   314 LEU   379 SER   485 HEM A 600
005 | 011 |         000006.9750 | 00000007713601.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
GLU   313 THR   314 LEU   379 CYS   445 SER   485 HEM A 600
004 | 011 |         000006.9350 | 00000008252349.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 ALA   317 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486
005 | 012 |         000006.9270 | 00000008364532.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 HEM A 600
004 | 012 |         000006.9210 | 00000008449670.0000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314 PRO   374
SER   375 PRO   376 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 MET   486 HEM A 600
004 | 013 |         000006.9050 | 00000008680963.0000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ILE   309 ALA   310
THR   314 SER   375 LEU   378 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
004 | 014 |         000006.8640 | 00000009302963.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
GLU   313 THR   314 LEU   379 SER   485 HEM A 600
004 | 015 |         000006.8590 | 00000009381804.0000 | PHE   116 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 PRO   374
SER   375 PRO   376 LEU   379 ALA   484 SER   485 MET   486
001 | 006 |         000006.8580 | 00000009397652.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 GLU   313 THR   314 SER   375
LEU   378 LEU   379 PRO   380 SER   485
002 | 008 |         000006.8560 | 00000009429428.0000 | PHE   116 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 SER   375
LEU   378 LEU   379 CYS   445 HEM A 600
005 | 013 |         000006.8350 | 00000009769640.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314
SER   375 LEU   379 CYS   445 HEM A 600
001 | 007 |         000006.8280 | 00000009885750.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486
001 | 008 |         000006.7980 | 00000010399200.0000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ILE   309 ALA   310
THR   314 SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 SER   485
005 | 014 |         000006.7230 | 00000011802545.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486
004 | 016 |         000006.7200 | 00000011862458.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486 HEM A 600
004 | 017 |         000006.7100 | 00000012064374.0000 | PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314 SER   375
LEU   378 LEU   379 SER   485 HEM A 600
005 | 015 |         000006.6950 | 00000012373710.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 GLU   313 THR   314 ALA   317
PRO   374 SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 SER   485 MET   486
004 | 018 |         000006.6910 | 00000012457531.0000 | PHE   116 ILE   218 VAL   219 ILE   309 ALA   310 THR   314 PRO   374
SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378 LEU   379 ALA   484 SER   485 MET   486
001 | 009 |         000006.6860 | 00000012563106.0000 | ILE   46 LEU   51 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378
PRO   380 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
002 | 009 |         000006.6760 | 00000012776948.0000 | ILE   46 LEU   51 TYR   52 VAL   219 PHE   226 SER   375 PRO   376 LEU
377 LEU   378 PRO   380 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
005 | 016 |         000006.6670 | 00000012972516.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 VAL   219 ILE   309 ALA   310 GLU   313
THR   314 SER   375 LEU   378 LEU   379 ALA   484
001 | 010 |         000006.6330 | 00000013738728.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 GLU   313 THR   314 SER   375
LEU   378 LEU   379 PRO   380 SER   485
```

```
005 | 017 |         000006.6260 | 00000013902010.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 ALA   317 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485
002 | 010 |         000006.6110 | 00000014258464.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314
PRO   374 SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
003 | 009 |         000006.6020 | 00000014476709.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314
PRO   374 SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
004 | 019 |         000006.5660 | 00000015383607.0000 | ILE   46 LEU   51 VAL   219 PHE   226 SER   375 PRO   376 LEU   377
LEU   378 PRO   380 ALA   483 ALA   484 SER   485
005 | 018 |         000006.5490 | 00000015831401.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314
SER   375 LEU   378 LEU   379 HEM A 600
004 | 020 |         000006.5450 | 00000015938645.0000 | LEU   51 PHE   116 ILE   218 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377
LEU   378 LEU   379 ALA   484 SER   485
005 | 019 |         000006.5140 | 00000016794794.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314
PRO   374 SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
002 | 011 |         000006.4990 | 00000017225420.0000 | PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314
SER   375 LEU   378 LEU   379 ALA   484
003 | 010 |         000006.4820 | 00000017726826.0000 | ILE   46 LEU   51 VAL   219 PHE   226 SER   375 PRO   376 LEU   377
LEU   378 PRO   380 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
005 | 020 |         000006.4770 | 00000017877058.0000 | ILE   46 LEU   51 VAL   219 PHE   226 SER   375 PRO   376 LEU   377
LEU   378 PRO   380 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
002 | 012 |         000006.4550 | 00000018553346.0000 | LEU   51 VAL   219 PRO   374 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378
LEU   379 PRO   380 LEU   401 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
003 | 011 |         000006.4490 | 00000018742190.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 GLU   313
THR   314 SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 SER   485
001 | 011 |         000006.4320 | 00000019287746.0000 | LEU   51 TYR   52 VAL   219 PRO   374 SER   375 PRO   376 LEU   377
LEU   378 LEU   379 PRO   380 LEU   401 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
002 | 013 |         000006.4110 | 00000019983644.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 VAL   219 ILE   309 ALA   310 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
002 | 014 |         000006.4050 | 00000020187044.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 GLU   313
THR   314 SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 SER   485
003 | 012 |         000006.3990 | 00000020392516.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313 THR   314
PRO   374 SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485
003 | 013 |         000006.3890 | 00000020739626.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485
003 | 014 |         000006.3730 | 00000021307332.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485
001 | 012 |         000006.3700 | 00000021415494.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 MET   306 ILE   309 ALA   310 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
003 | 015 |         000006.3550 | 00000021964596.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 MET   306 ILE   309 GLU   313 THR   314
ALA   317 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486 SER   487 HEM A 600
003 | 016 |         000006.3440 | 00000022376200.0000 | LEU   51 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378 LEU   379 ALA   484 SER   485 MET   486
003 | 017 |         000006.3130 | 00000023578146.0000 | LEU   51 PHE   116 ILE   218 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377
LEU   378 LEU   379 ALA   484 SER   485
```

```
001 | 013 |         000006.3100 | 00000023697836.0000 | PHE   215 ILE   218 VAL   219 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314
SER   375 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485
002 | 015 |         000006.2560 | 00000025959194.0000 | LEU   51 TYR   52 PHE   116 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377
LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   483 ALA   484
002 | 016 |         000006.2550 | 00000026003044.0000 | LEU   51 PHE   116 ILE   218 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377
LEU   378 LEU   379 ALA   484
001 | 014 |         000006.2230 | 00000027446092.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
002 | 017 |         000006.2170 | 00000027725448.0000 | ILE   46 LEU   51 TYR   52 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU
378 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
003 | 018 |         000006.1790 | 00000029561940.0000 | LEU   51 PHE   116 PHE   215 ILE   218 VAL   219 SER   375 PRO   376
LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485
001 | 015 |         000006.1740 | 00000029812472.0000 | LEU   51 VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 SER   375 PRO   376
LEU   377 LEU   378 LEU   379 ALA   484
001 | 016 |         000006.1690 | 00000030065128.0000 | LEU   51 VAL   115 PHE   116 MET   306 PRO   374 SER   375 PRO   376
LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
001 | 017 |         000006.1680 | 00000030115914.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 MET   306 ILE   309 ALA   310 GLU   313
THR   314 ALA   317 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486 HEM A 600
002 | 018 |         000006.1590 | 00000030576878.0000 | ILE   46 LYS   47 PRO   48 GLY   49 PRO   50 LEU   51 VAL   219 PHE
226 ALA   483 ALA   484
003 | 019 |         000006.1550 | 00000030784010.0000 | ILE   46 LYS   47 PRO   48 GLY   49 PRO   50 LEU   51 VAL   219 ALA
483 ALA   484 SER   485
001 | 018 |         000006.1100 | 00000033213192.0000 | LEU   51 THR   101 PHE   116 ILE   218 VAL   219 PRO   374 SER   375
PRO   376 LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
002 | 019 |         000006.1100 | 00000033213192.0000 | ILE   46 LEU   51 TYR   52 VAL   219 PRO   374 SER   375 PRO   376 LEU
377 LEU   378 GLY   482 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
002 | 020 |         000006.1010 | 00000033721564.0000 | LEU   51 PHE   116 ILE   218 VAL   219 PRO   374 SER   375 PRO   376
LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
003 | 020 |         000006.0880 | 00000034469648.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 GLU   313
THR   314 PRO   374 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485 MET   486
001 | 019 |         000006.0620 | 00000036015968.0000 | VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309
GLU   313 THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486
001 | 020 |         000006.0360 | 00000037631656.0000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ILE   309 ALA   310
SER   375 LEU   378 LEU   379 ALA   484

After clustering the 100 runs, the following 9 distinct complex conformations were found:
[They all differ by at least 5.0 A heavy ligand atom RMSD, and have been saved as YOb files with terminal number "Num"]

Num | Rec | Run |Bind.energy[kcal/mol]|Dissoc. constant [pM]| Contacting receptor residues
----+-----+-----+---------------------+---------------------+----------------------------
001 | 002 | 001 |         000008.2560 | 00000000887711.3125 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA
310 THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 MET   486 HEM A 600
002 | 001 | 002 |         000007.7200 | 00000002193638.0000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 VAL   219 MET   306 ALA   310 THR
314 PRO   374 SER   375 LEU   378 LEU   379 CYS   445 ALA   484 SER   485 HEM A 600
```

```
003 | 001 | 003 |         000007.5170 | 00000003090053.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU
313 THR   314 ALA   317 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486
004 | 002 | 003 |         000007.0430 | 00000006877214.0000 | LEU   51 TYR   52 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU
378 LEU   379 PRO   380 LEU   401 GLY   482 ALA   483 ALA   484 MET   486
005 | 005 | 003 |         000006.7230 | 00000011802545.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 GLU
313 THR   314 PRO   374 SER   375 LEU   379 SER   485 MET   486
006 | 001 | 004 |         000006.6860 | 00000012563106.0000 | ILE   46 LEU   51 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU   377 LEU
378 PRO   380 ALA   483 ALA   484 SER   485 MET   486
007 | 004 | 004 |         000006.5450 | 00000015938645.0000 | LEU   51 PHE   116 ILE   218 VAL   219 SER   375 PRO   376 LEU
377 LEU   378 LEU   379 ALA   484 SER   485
008 | 003 | 005 |         000006.1790 | 00000029561940.0000 | LEU   51 PHE   116 PHE   215 ILE   218 VAL   219 SER   375 PRO
376 LEU   377 LEU   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485
009 | 002 | 006 |         000006.1590 | 00000030576878.0000 | ILE   46 LYS   47 PRO   48 GLY   49 PRO   50 LEU   51 VAL   219
PHE   226 ALA   483 ALA   484
```

c)CYP81AA2(mut6) rigid receptor, all 25 docking results

```
Global docking result analysis
==============================

25 VINA docking runs of the ligand object 2 to the receptor object 1 yielded the following results,
sorted by binding energy [more positive energies indicate stronger binding, and negative energies mean no binding]

Run |Bind.energy[kcal/mol]|Dissoc. constant [pM]| Contacting receptor residues
----+--------------------+--------------------+----------------------------
001 |         000008.4470 | 00000000643082.8125 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR
314 PRO   374 ALA   375 LEU   379 SER   485 HEM A 600
002 |         000008.4470 | 00000000643082.8125 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR
314 PRO   374 ALA   375 LEU   379 SER   485 HEM A 600
003 |         000008.2310 | 00000000925970.1875 | VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ARG   249 THR   305 MET
306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 HEM A 600
004 |         000008.2310 | 00000000925970.1875 | VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ARG   249 THR   305 MET
306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 HEM A 600
005 |         000008.0280 | 00000001304361.5000 | LEU   107 VAL   115 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE   243 ARG   249 THR
305 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 ALA   484
006 |         000008.0280 | 00000001304361.5000 | LEU   107 VAL   115 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE   243 ARG   249 THR
305 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 ALA   484
007 |         000008.0100 | 00000001344597.0000 | LEU   107 VAL   115 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE   243 ARG   249 THR
305 MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 HEM A 600
008 |         000008.0100 | 00000001344597.0000 | LEU   107 VAL   115 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE   243 ARG   249 THR
305 MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 HEM A 600
009 |         000008.0030 | 00000001360577.2500 | LEU   107 THR   108 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE
218 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314
010 |         000008.0030 | 00000001360577.2500 | LEU   107 THR   108 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE
218 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314
011 |         000007.9940 | 00000001381402.7500 | VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE   243 ARG   249 THR
305 MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 ALA   484 HEM A 600
012 |         000007.7560 | 00000002064318.1250 | LEU   107 THR   108 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE
218 ARG   249 GLY   302 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379
013 |         000007.6370 | 00000002523508.5000 | LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 THR   305 MET
306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 ALA   484 HEM A 600
014 |         000007.6230 | 00000002583847.7500 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 PRO   376 LEU   377 SER   378
LEU   379 PRO   380 LEU   401 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
015 |         000007.5370 | 00000002987485.0000 | VAL   115 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET
306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 ALA   484 HEM A 600
016 |         000007.4010 | 00000003758331.2500 | VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 THR   305 MET   306 ILE
309 ALA   310 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
017 |         000007.3400 | 00000004165898.2500 | PHE   113 VAL   115 PHE   116 ILE   218 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA
310 THR   314 ALA   375 LEU   379 ALA   484 HEM A 600
```

```
018 |         000007.2920 | 00000004517447.5000 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO   376 LEU   377
SER   378 LEU   379 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
019 |         000007.2890 | 00000004540379.5000 | LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 THR   305 MET
306 ILE   309 ALA   310 THR   314 ALA   484 SER   485
020 |         000007.2020 | 00000005258525.5000 | LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE
243 GLY   246 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 ALA   484
021 |         000007.1530 | 00000005711911.5000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314 ALA
375 SER   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485
022 |         000007.0800 | 00000006460873.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 THR   314 ALA   375 LEU
379 ALA   484 HEM A 600
023 |         000007.0090 | 00000007283412.0000 | PHE   116 ILE   218 ILE   309 ALA   310 THR   314 ALA   375 SER   378 LEU
379 ALA   484 SER   485
024 |         000006.9850 | 00000007584502.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA
310 THR   314 ALA   375 ALA   484 SER   485
025 |         000006.8740 | 00000009147264.0000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 ALA
375 SER   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484

After clustering the 25 runs, the following 7 distinct complex conformations were found:
[They all differ by at least 5.0 A heavy atom RMSD]

Clu |Bind.energy[kcal/mol]|Dissoc. constant [pM]| Contacting receptor residues
----+--------------------+--------------------+----------------------------
001 |         000008.4470 | 00000000643082.8125 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR
314 PRO   374 ALA   375 LEU   379 SER   485 HEM A 600
002 |         000008.2310 | 00000000925970.1875 | VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ARG   249 THR   305 MET
306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 HEM A 600
003 |         000007.7560 | 00000002064318.1250 | LEU   107 THR   108 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE
218 ARG   249 GLY   302 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379
004 |         000007.6230 | 00000002583847.7500 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 PRO   376 LEU   377 SER   378
LEU   379 PRO   380 LEU   401 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
005 |         000007.2920 | 00000004517447.5000 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO   376 LEU   377
SER   378 LEU   379 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
006 |         000007.1530 | 00000005711911.5000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 ILE   309 ALA   310 GLU   313 THR   314 ALA
375 SER   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484 SER   485
007 |         000006.8740 | 00000009147264.0000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 ALA
375 SER   378 LEU   379 PRO   380 ALA   484
```

d) CYP81AA2(mut6) flexible receptor sidechains, all 100 docking results

Ensemble docking result analysis
==========

The ligand was docked 20 times ["Run"] with VINA against each of the 5 receptors ["Rec"] in the ensemble, yielding the following 100 results, sorted by binding energy:
[More positive energies indicate stronger binding, and negative energies mean no binding]

Rec	Run	Bind.energy[kcal/mol]	Dissoc. constant [pM]	Contacting receptor residues
001	001	000008.4390	00000000651824.9375	VAL 115 PHE 116 PHE 215 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 PRO 374 ALA 375 LEU 379 SER 485 HEM A 600
001	002	000008.2390	00000000913551.2500	VAL 115 PHE 116 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 LEU 379 HEM A 600
001	003	000008.0320	00000001295585.1250	LEU 107 VAL 115 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ILE 243 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 ALA 484
001	004	000008.0020	00000001362875.6250	LEU 107 VAL 115 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ILE 243 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 LEU 379 HEM A 600
001	005	000008.0020	00000001362875.6250	LEU 107 VAL 115 PHE 116 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ILE 243 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 LEU 379 ALA 484 HEM A 600
001	006	000007.9960	00000001376747.5000	LEU 107 THR 108 PHE 113 VAL 115 PHE 116 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ILE 243 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314
001	007	000007.9070	00000001599897.5000	VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 ALA 375 LEU 379 ALA 484 HEM A 600
001	008	000007.8600	00000001731982.8750	LEU 107 PHE 113 VAL 115 PHE 116 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ILE 243 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310
004	001	000007.8340	00000001809680.2500	ARG 98 PRO 99 LYS 100 THR 101 SER 103 GLY 104 PHE 116 ILE 218 VAL 219 LEU 379 PRO 380
001	009	000007.7610	00000002046970.3750	PHE 113 VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 THR 314 SER 485 HEM A 600
002	001	000007.7520	00000002078302.0000	THR 101 SER 103 GLY 104 LEU 107 PHE 113 PHE 116 LEU 214 PRO 217 ILE 218 VAL 219 PRO 223 ILE 243 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309
003	001	000007.7520	00000002078302.0000	THR 101 SER 103 GLY 104 LEU 107 PHE 113 PHE 116 LEU 214 PRO 217 ILE 218 VAL 219 PRO 223 ILE 243 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309
005	001	000007.7280	00000002164217.5000	VAL 115 PHE 215 ILE 218 MET 306 ALA 310 THR 314 ALA 375 LEU 379 CYS 445 PRO 446 ALA 484 SER 485 HEM A 600
001	010	000007.7140	00000002215965.7500	VAL 115 PHE 116 PHE 215 MET 306 ALA 310 THR 314 PRO 374 ALA 375 LEU 379 ALA 484 SER 485 HEM A 600
001	011	000007.7010	00000002265125.0000	LEU 107 THR 108 PHE 113 VAL 115 PHE 116 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ARG 249 GLY 302 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 LEU 379
001	012	000007.6870	00000002319286.0000	LEU 107 VAL 115 PHE 116 PHE 215 ILE 218 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 LEU 379 ALA 484 HEM A 600
001	013	000007.6450	00000002489663.7500	LEU 107 PHE 113 VAL 115 LEU 214 PHE 215 ILE 218 ILE 243 ARG 249 THR 305 MET 306 ILE 309 ALA 310 LEU 379 ALA 484

```
001 | 014 |         000007.6280 | 00000002562134.2500 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 PRO   376 LEU   377 SER
378 LEU   379 PRO   380 LEU   401 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
005 | 002 |         000007.5590 | 00000002878588.2500 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116
LEU   214 PRO   217 ILE   218 PRO   223 ILE   242 ILE   243 MET   306 ILE   309
002 | 002 |         000007.5430 | 00000002957383.7500 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 PHE   116 LEU   214
PRO   217 ILE   218 PRO   223 ILE   243 ARG   249 THR   305 ILE   309
003 | 002 |         000007.5430 | 00000002957383.7500 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 PHE   116 LEU   214
PRO   217 ILE   218 PRO   223 ILE   243 ARG   249 THR   305 ILE   309
005 | 003 |         000007.5400 | 00000002972396.2500 | VAL   115 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314 PRO   374
ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
004 | 002 |         000007.5020 | 00000003169283.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
004 | 003 |         000007.4920 | 00000003223229.2500 | ARG   98 PRO   99 LYS   100 THR   101 GLY   104 THR   108 PHE   116
ILE   218 VAL   219 PRO   380
002 | 003 |         000007.4880 | 00000003245063.7500 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 VAL   219 GLN   480 GLY   482
THR   483 SER   487
003 | 003 |         000007.4880 | 00000003245063.7500 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 VAL   219 GLN   480 GLY   482
THR   483 SER   487
005 | 004 |         000007.4870 | 00000003250545.5000 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 ILE   218 VAL   219 GLN   480
GLY   482 THR   483 ALA   484 SER   487
005 | 005 |         000007.4820 | 00000003278093.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 PHE   116 LEU   214
PRO   217 ILE   218 PRO   223 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309
004 | 004 |         000007.4770 | 00000003305874.2500 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 ILE   218 VAL   219 GLN   480
GLY   482 THR   483 SER   487
002 | 004 |         000007.4380 | 00000003530804.7500 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   116 LEU   214 PRO   217
ILE   218 PRO   223 ILE   242 ILE   243 GLY   246 ARG   249 ILE   309
003 | 004 |         000007.4380 | 00000003530804.7500 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   116 LEU   214 PRO   217
ILE   218 PRO   223 ILE   242 ILE   243 GLY   246 ARG   249 ILE   309
002 | 005 |         000007.3910 | 00000003822303.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
003 | 005 |         000007.3910 | 00000003822303.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
002 | 006 |         000007.3300 | 00000004236808.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314
ALA   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 HEM A 600
003 | 006 |         000007.3300 | 00000004236808.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314
ALA   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 HEM A 600
002 | 007 |         000007.3280 | 00000004251134.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
003 | 007 |         000007.3280 | 00000004251134.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
PRO   374 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
001 | 015 |         000007.3250 | 00000004272714.0000 | LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306
ILE   309 ALA   310 THR   314 ALA   484 SER   485
004 | 005 |         000007.3240 | 00000004279931.5000 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO   376 LEU
377 SER   378 LEU   379 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
```

```
002 | 008 |         000007.3220 | 00000004294403.5000 | PRO   48 GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO
376 LEU   377 SER   378 LEU   379 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
003 | 008 |         000007.3220 | 00000004294403.5000 | PRO   48 GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO
376 LEU   377 SER   378 LEU   379 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
005 | 006 |         000007.3170 | 00000004330797.5000 | PRO   48 GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO
376 LEU   377 SER   378 LEU   379 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
001 | 016 |         000007.3140 | 00000004352782.0000 | LEU   107 THR   108 PHE   113 VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218
ARG   249 GLY   302 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 ALA   484
001 | 017 |         000007.3000 | 00000004456860.5000 | VAL   115 PHE   116 ILE   218 ILE   309 ALA   310 THR   314 ALA   375
LEU   379 ALA   484 HEM A 600
001 | 018 |         000007.3000 | 00000004456860.5000 | PRO   48 GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO
376 LEU   377 SER   378 LEU   379 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484 SER   485
002 | 009 |         000007.2530 | 00000004824813.0000 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 ILE   218 VAL   219 PRO   376 LEU
377 SER   378 LEU   379 PRO   380 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
003 | 009 |         000007.2530 | 00000004824813.0000 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 ILE   218 VAL   219 PRO   376 LEU
377 SER   378 LEU   379 PRO   380 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
002 | 010 |         000007.2480 | 00000004865702.5000 | LEU   107 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
GLU   313 THR   314 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485
003 | 010 |         000007.2480 | 00000004865702.5000 | LEU   107 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
GLU   313 THR   314 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485
005 | 007 |         000007.2390 | 00000004940178.5000 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 PRO   376 LEU   377 SER
378 LEU   379 PRO   380 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
004 | 006 |         000007.2140 | 00000005153092.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 PHE   116 LEU   214
PRO   217 ILE   218 PRO   223 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309
005 | 008 |         000007.2040 | 00000005240805.0000 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 ILE   218 VAL   219 GLN   480
GLY   482 THR   483 ALA   484 SER   487 PRO   491
002 | 011 |         000007.2020 | 00000005258525.5000 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 VAL   219 GLN   480 GLY   482
THR   483 SER   487 PRO   491
003 | 011 |         000007.2020 | 00000005258525.5000 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 VAL   219 GLN   480 GLY   482
THR   483 SER   487 PRO   491
004 | 007 |         000007.2010 | 00000005267408.5000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ALA   310 THR   314
ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
004 | 008 |         000007.1960 | 00000005312049.0000 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 ILE   218 VAL   219 GLN   480
GLY   482 THR   483 SER   487 PRO   491
004 | 009 |         000007.0910 | 00000006342027.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314
ALA   375 LEU   379 CYS   445 ALA   484 HEM A 600
005 | 009 |         000007.0900 | 00000006352740.0000 | THR   101 SER   103 LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214
PRO   217 ILE   218 VAL   219 PRO   223 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309
004 | 010 |         000007.0800 | 00000006460873.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 GLU   313
THR   314 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485
001 | 019 |         000007.0770 | 00000006493670.0000 | LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218
ILE   243 ARG   249 MET   306 ILE   309 ALA   310
004 | 011 |         000007.0370 | 00000006947213.0000 | THR   101 SER   103 LEU   107 PHE   116 LEU   214 PRO   217 ILE   218
PRO   223 ILE   242 ILE   243 ARG   249 MET   306 ILE   309
```

```
005 | 010 |         000007.0090 | 00000007283412.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 PHE   116 LEU   214
PRO   217 ILE   218 PRO   223 ILE   243 ARG   249 THR   305 ILE   309
004 | 012 |         000006.9740 | 00000007726632.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   116 LEU   214 PRO   217
ILE   218 PRO   223 ILE   242 ILE   243 ARG   249
005 | 011 |         000006.9730 | 00000007739684.0000 | ARG   98 LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 ILE   218
ILE   243 GLY   246 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309
002 | 012 |         000006.9670 | 00000007818461.0000 | LYS   173 PHE   215 PHE   216 ILE   218 GLU   313 GLN   480 GLY   482
THR   483 ALA   484 SER   485 SER   487 PRO   491
003 | 012 |         000006.9670 | 00000007818461.0000 | LYS   173 PHE   215 PHE   216 ILE   218 GLU   313 GLN   480 GLY   482
THR   483 ALA   484 SER   485 SER   487 PRO   491
005 | 012 |         000006.9620 | 00000007884721.0000 | LYS   173 PHE   215 PHE   216 GLU   313 GLN   480 GLY   482 THR   483
ALA   484 SER   485 SER   487 PRO   491
005 | 013 |         000006.9550 | 00000007978429.5000 | THR   101 GLY   104 LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214
ILE   218 ILE   243 GLY   246 ARG   249 MET   306 ILE   309 LEU   379 PRO   380
004 | 013 |         000006.9460 | 00000008100549.5000 | LEU   107 THR   108 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215
ILE   218 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379
005 | 014 |         000006.9270 | 00000008364532.5000 | LYS   100 THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   116 LEU   214
ILE   218 ILE   243 GLY   246 ARG   249 MET   306 ILE   309 LEU   379
005 | 015 |         000006.8140 | 00000010122127.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 THR   108 PHE   113 PHE   116
LEU   214 ILE   218 ILE   243 GLY   246 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309
001 | 020 |         000006.8080 | 00000010225153.0000 | LEU   107 VAL   115 PHE   116 LEU   214 ILE   218 ILE   243 ARG   249
THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 LEU   379 ALA   484
004 | 014 |         000006.7970 | 00000010416767.0000 | LEU   107 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE   243 ARG   249
THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314 LEU   379 ALA   484 SER   485
002 | 013 |         000006.7900 | 00000010540568.0000 | PRO   48 GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO
376 LEU   377 SER   378 LEU   379 PRO   380 GLY   482 THR   483 ALA   484
003 | 013 |         000006.7900 | 00000010540568.0000 | PRO   48 GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO
376 LEU   377 SER   378 LEU   379 PRO   380 GLY   482 THR   483 ALA   484
005 | 016 |         000006.7710 | 00000010884067.0000 | ARG   98 GLY   104 LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214
ILE   218 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309 LEU   379 PRO   380
004 | 015 |         000006.7610 | 00000011069329.0000 | LYS   173 PHE   211 LYS   212 PHE   215 PHE   216 VAL   219 GLU   313
GLN   480 GLY   482 THR   483 SER   487 ARG   488
002 | 014 |         000006.7530 | 00000011219806.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 THR   108 PHE   113 PHE   116
ILE   218 GLY   302 THR   305 MET   306 ILE   309
003 | 014 |         000006.7530 | 00000011219806.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 THR   108 PHE   113 PHE   116
ILE   218 GLY   302 THR   305 MET   306 ILE   309
002 | 015 |         000006.7370 | 00000011526926.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 THR   108 PHE   113 PHE   116
LEU   214 PRO   217 ILE   218 PRO   223 ILE   242 ILE   243 THR   305 ILE   309
003 | 015 |         000006.7370 | 00000011526926.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 THR   108 PHE   113 PHE   116
LEU   214 PRO   217 ILE   218 PRO   223 ILE   242 ILE   243 THR   305 ILE   309
005 | 017 |         000006.7040 | 00000012187169.0000 | ARG   98 PRO   99 LYS   100 THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107
PHE   113 VAL   115 PHE   116 ILE   243 LEU   379 PRO   380
002 | 016 |         000006.6750 | 00000012798531.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 THR   314 PRO   374
ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 LEU   486 HEM A 600
```

```
003 | 016 |         000006.6750 | 00000012798531.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 THR   314 PRO   374
ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 LEU   486 HEM A 600
002 | 017 |         000006.6610 | 00000013104554.0000 | LEU   107 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE   243 ARG   249
MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 ALA   484
003 | 017 |         000006.6610 | 00000013104554.0000 | LEU   107 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ILE   243 ARG   249
MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 ALA   484
004 | 016 |         000006.6540 | 00000013260299.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 THR   314 PRO   374
ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 LEU   486 HEM A 600
002 | 018 |         000006.6450 | 00000013463266.0000 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 GLN   480 SER   487 ARG   488
LYS   489 LYS   490 PRO   491 LEU   492
003 | 018 |         000006.6450 | 00000013463266.0000 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 GLN   480 SER   487 ARG   488
LYS   489 LYS   490 PRO   491 LEU   492
005 | 018 |         000006.6350 | 00000013692430.0000 | ARG   98 PRO   99 LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 PRO   217
ILE   218 ILE   243 LEU   379 PRO   380
004 | 017 |         000006.6250 | 00000013925494.0000 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 GLN   480 THR   483 SER   487
ARG   488 LYS   489 LYS   490 PRO   491 LEU   492
005 | 019 |         000006.6140 | 00000014186450.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116
LEU   214 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309
004 | 018 |         000006.5990 | 00000014550197.0000 | THR   101 SER   103 LEU   107 PHE   116 PRO   217 ILE   218 PRO   223
ILE   242 ILE   243 LEU   379 PRO   380
005 | 020 |         000006.5790 | 00000015049742.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 LEU   214 PRO   217
ILE   218 PRO   223 ILE   243 GLY   246 ARG   249 MET   306 ILE   309
004 | 019 |         000006.5100 | 00000016908564.0000 | LEU   107 PHE   116 PHE   215 ILE   218 THR   305 MET   306 ILE   309
ALA   310 THR   314 LEU   379 ALA   484
002 | 019 |         000006.4890 | 00000017518622.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314
ALA   375 LEU   379 ALA   484 HEM A 600
003 | 019 |         000006.4890 | 00000017518622.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310 THR   314
ALA   375 LEU   379 ALA   484 HEM A 600
004 | 020 |         000006.4790 | 00000017816814.0000 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 ILE   218 MET   306 ILE   309 ALA   310
GLU   313 THR   314 PRO   374 ALA   375 SER   378 LEU   379 SER   485 HEM A 600
002 | 020 |         000006.4690 | 00000018120080.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310
THR   314 PRO   374 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485
003 | 020 |         000006.4690 | 00000018120080.0000 | PHE   116 PHE   215 ILE   218 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310
THR   314 PRO   374 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485

After clustering the 100 runs, the following 12 distinct complex conformations were found:
[They all differ by at least 5.0 A heavy ligand atom RMSD, and have been saved as YOb files with terminal number "Num"]

Num | Rec | Run |Bind.energy[kcal/mol]|Dissoc. constant [pM]| Contacting receptor residues
----+-----+-----+---------------------+--------------------+---------------------------
001 | 001 | 001 |         000008.4390 | 00000000651824.9375 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA
310 THR   314 PRO   374 ALA   375 LEU   379 SER   485 HEM A 600
002 | 001 | 002 |         000008.2390 | 00000000913551.2500 | VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE   218 ARG   249 THR
305 MET   306 ILE   309 ALA   310 LEU   379 HEM A 600
```

```
003 | 001 | 003 |         000007.8600 | 00000001731982.8750 | LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE   116 LEU   214 PHE   215 ILE
218 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309 ALA   310
004 | 004 | 001 |         000007.8340 | 00000001809680.2500 | ARG   98 PRO   99 LYS   100 THR   101 SER   103 GLY   104 PHE
116 ILE   218 VAL   219 LEU   379 PRO   380
005 | 002 | 001 |         000007.7520 | 00000002078302.0000 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 PHE   116 LEU
214 PRO   217 ILE   218 VAL   219 PRO   223 ILE   243 ARG   249 THR   305 MET   306 ILE   309
006 | 001 | 004 |         000007.7140 | 00000002215965.7500 | VAL   115 PHE   116 PHE   215 MET   306 ALA   310 THR   314 PRO
374 ALA   375 LEU   379 ALA   484 SER   485 HEM A 600
007 | 001 | 005 |         000007.6280 | 00000002562134.2500 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 PRO   376 LEU
377 SER   378 LEU   379 PRO   380 LEU   401 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
008 | 005 | 002 |         000007.5590 | 00000002878588.2500 | THR   101 SER   103 GLY   104 LEU   107 PHE   113 VAL   115 PHE
116 LEU   214 PRO   217 ILE   218 PRO   223 ILE   242 ILE   243 MET   306 ILE   309
009 | 004 | 003 |         000007.4920 | 00000003223229.2500 | ARG   98 PRO   99 LYS   100 THR   101 GLY   104 THR   108 PHE
116 ILE   218 VAL   219 PRO   380
010 | 002 | 003 |         000007.4880 | 00000003245063.7500 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 VAL   219 GLN   480 GLY
482 THR   483 SER   487
011 | 004 | 005 |         000007.3240 | 00000004279931.5000 | GLY   49 PRO   50 LEU   51 TYR   52 VAL   219 ALA   375 PRO
376 LEU   377 SER   378 LEU   379 ALA   481 GLY   482 THR   483 ALA   484
012 | 005 | 007 |         000007.2040 | 00000005240805.0000 | LYS   173 LYS   212 PHE   215 PHE   216 ILE   218 VAL   219 GLN
480 GLY   482 THR   483 ALA   484 SER   487 PRO   491
```