

Table 1: Loop Occupancies & Binding Affinities[?] [?]

<i>PDB</i>	Ligand	C	I	O	ΔG_{exp}	σ_{exp}
4W52	benzene	0.9	-	-	-5.19	0.16
4W53	toluene	0.8	0.2	-	-5.52	0.04
4W54	ethylbenzene	0.5	0.5	-	-5.76	0.07
4W55	n-propylbenzene	0.6	0.4	-	-6.55	0.02
4W56	sec-butylbenzene	0.4	0.6	-	N/A	-
4W57	n-butylbenzene	0.1	0.6	0.3	-6.70	0.02
4W58	n-pentylbenzene	0.3	-	0.7	N/A	-
4W59	n-hexylbenzene	0.3	-	0.7	N/A	-

Table 2: Closed-Intermediate Transformations

Ligand 1	Ligand 2	$\Delta\Delta G_C$	σ_C	$\Delta\Delta G_O$	σ_O	$\Delta\Delta G_\epsilon$
benzene	n-butylbenzene	0.58	0.07	-0.59	0.09	1.17
toluene	n-butylbenzene	-0.28	0.06	-1.27	0.09	0.99
ethylbenzene	n-butylbenzene	0.24	0.07	-0.23	0.07	0.47
n-propylbenzene	n-butylbenzene	0.99	0.06	0.63	0.04	0.36
benzene	sec-butylbenzene	2.36	0.09	2.14	0.11	0.22
toluene	sec-butylbenzene	1.47	0.07	1.14	0.09	0.33
ethylbenzene	sec-butylbenzene	1.90	0.08	1.77	0.07	0.13
n-propylbenzene	sec-butylbenzene	2.86	0.06	2.67	0.05	0.19

Table 3: Closed-Intermediate Transformations pREST

Ligand 1	Ligand 2	$\Delta\Delta G_C$	σ_C	$\Delta\Delta G_O$	σ_O	$\Delta\Delta G_\epsilon$
benzene	n-butylbenzene	-0.10	0.11	-0.72	0.12	0.62
toluene	n-butylbenzene	0.90	0.09	-0.36	0.09	1.26
ethylbenzene	n-butylbenzene	-0.20	0.09	-0.43	0.08	0.23
n-propylbenzene	n-butylbenzene	1.00	0.07	0.49	0.06	0.51
benzene	sec-butylbenzene	0.45	0.08	1.34	0.12	0.89
toluene	sec-butylbenzene	0.60	0.12	0.60	0.10	0.0
ethylbenzene	sec-butylbenzene	1.09	0.10	1.69	0.09	0.60
n-propylbenzene	sec-butylbenzene	1.88	0.07	3.05	0.08	1.17

Table 4: Closed-Intermediate Transformations pREST 15-25ns

Ligand 1	Ligand 2	$\Delta\Delta G_C$	σ_C	$\Delta\Delta G_O$	σ_O	$\Delta\Delta G_\epsilon$
benzene	n-butylbenzene	-1.15	0.09	-0.72	0.12	0.43
toluene	n-butylbenzene	-0.52	0.09	-0.36	0.09	0.16
ethylbenzene	n-butylbenzene	-0.20	0.09	-0.43	0.08	0.23
n-propylbenzene	n-butylbenzene	0.53	0.07	0.49	0.06	0.04
benzene	sec-butylbenzene	0.45	0.08	1.34	0.12	0.89
toluene	sec-butylbenzene	0.60	0.12	0.60	0.10	0.0
ethylbenzene	sec-butylbenzene	1.09	0.10	1.69	0.09	0.60
n-propylbenzene	sec-butylbenzene	1.88	0.07	1.84	0.06	0.04

Table 5: Closed-Open Transformations

Ligand 1	Ligand 2	$\Delta\Delta G_C$	σ_C	$\Delta\Delta G_O$	σ_O	$\Delta\Delta G_\epsilon$
benzene	n-pentylbenzene	2.36	0.12	-1.33	0.11	3.69
toluene	n-pentylbenzene	1.77	0.09	0.34	0.10	1.43
ethylbenzene	n-pentylbenzene	2.45	0.08	0.46	0.09	1.99
n-propylbenzene	n-pentylbenzene	3.46	0.08	-0.22	0.08	3.68
benzene	n-hexylbenzene	4.13	0.16	-0.61	0.15	4.74
toluene	n-hexylbenzene	2.90	0.14	-1.63	0.08	4.53
ethylbenzene	n-hexylbenzene	3.63	0.11	-0.76	0.09	4.39
n-propylbenzene	n-hexylbenzene	5.85	0.10	0.13	0.06	5.72

^a Some text; ^b Some more text.

Table 6: Closed-Open Transformations pREST

Ligand 1	Ligand 2	$\Delta\Delta G_C$	σ_C	$\Delta\Delta G_O$	σ_O	$\Delta\Delta G_\epsilon$
benzene	n-pentylbenzene	1.45	0.13	0.15	0.10	1.30
toluene	n-pentylbenzene	1.40	0.13	0.82	0.11	0.58
ethylbenzene	n-pentylbenzene	2.89	0.10	1.32	0.10	1.57
n-propylbenzene	n-pentylbenzene	4.40	0.12	1.06	0.09	3.34
benzene	n-hexylbenzene	2.74	0.19	1.37	0.13	1.37
toluene	n-hexylbenzene	3.21	0.15	-1.08	0.09	4.29
ethylbenzene	n-hexylbenzene	3.39	0.11	-0.14	0.10	3.53
n-propylbenzene	n-hexylbenzene	4.93	0.12	1.28	0.10	3.65

^a Some text; ^b Some more text.

Table 7: Closed-Open Transformations pREST 40-55ns

Ligand 1	Ligand 2	$\Delta\Delta G_C$	σ_C	$\Delta\Delta G_O$	σ_O	$\Delta\Delta G_\epsilon$
benzene	n-pentylbenzene	1.86	0.06	1.50	0.06	0.36
toluene	n-pentylbenzene	1.03	0.06	0.71	0.06	0.32
ethylbenzene	n-pentylbenzene	1.69	0.06	1.60	0.06	0.09
n-propylbenzene	n-pentylbenzene	3.43	0.04	2.44	0.04	0.99
benzene	n-hexylbenzene	2.14	0.08	1.41	0.07	0.73
toluene	n-hexylbenzene	0.33	0.08	1.16	0.06	0.84
ethylbenzene	n-hexylbenzene	1.97	0.07	2.39	0.06	0.42
n-propylbenzene	n-hexylbenzene	3.49	0.06	3.44	0.05	0.05

^a Some text; ^b Some more text.

Table 8: Exp Set

Ligand 1	Ligand 2	ΔG_{exp}	σ_{exp}	$\Delta\Delta G_C$	σ_C	$\Delta\Delta G_O$	σ_O
benzene	toluene	-0.33	0.16	0.71	0.04	0.59	0.05
benzene	ethylbenzene	-0.19	0.17	0.15	0.05	-0.09	0.06
benzene	n-propylbenzene	-1.36	0.16	-0.82	0.07	0.06	0.06
toluene	ethylbenzene	-0.24	0.08	-0.59	0.05	0.05	0.05
toluene	n-propylbenzene	-1.03	0.04	-2.21	0.05	0.05	0.05
ethylbenzene	n-propylbenzene	-0.79	0.07	-0.86	0.05	0.03	0.03
benzene	n-butylbenzene	-1.51	0.16	0.58	0.07	-0.59	0.09
toluene	n-butylbenzene	-1.18	0.04	-0.28	0.06	0.09	0.09
ethylbenzene	n-butylbenzene	-0.94	0.07	0.24	0.07	-0.23	0.07
n-propylbenzene	n-butylbenzene	-0.15	0.03	0.99	0.06	0.63	0.04

Table 9: exp set pREST

Ligand 1	Ligand 2	ΔG_{exp}	σ_{exp}	$\Delta\Delta G_C$	σ_C	$\Delta\Delta G_O$	σ_O
benzene	toluene	-0.33	0.16	0.10	0.08	0.31	0.07
benzene	ethylbenzene	-0.19	0.17	-0.20	0.08	-0.62	0.08
benzene	n-propylbenzene	-1.36	0.16	-1.57	0.09	-1.26	0.09
toluene	ethylbenzene	-0.24	0.08	-0.84	0.07	-0.83	0.07
toluene	n-propylbenzene	-1.03	0.04	-1.91	0.09	-1.44	0.08
ethylbenzene	n-propylbenzene	-0.79	0.07	-1.08	0.07	-0.80	0.06
benzene	n-butylbenzene	-1.51	0.16	-1.15	0.11	-0.72	0.12
toluene	n-butylbenzene	-1.18	0.04	-0.65	0.09	-0.36	0.09
ethylbenzene	n-butylbenzene	-0.94	0.07	-0.20	0.09	-0.43	0.08
n-propylbenzene	n-butylbenzene	-0.15	0.03	0.53	0.07	0.49	0.06