

## AUTHOR INDEX

Numbers in parentheses are reference numbers and indicate that the author's work is referred to although his name is not mentioned in the text. Numbers in *italic* show the pages on which the complete references are listed.

- Abkevich, V.: 2-4(9), 7(9,35), 29-30(9), 32-33;  
 39(52), 53-55(52), 57-58(52), 64(101), 72,  
 74
- Abola, E. E.: 173(235), 192; 224(5), 262;  
 462(69), 486
- Adams, N., 365(147), 452
- Adjiman, C. S., 270(14-17), 273(14-15),  
 279(15-17), 298(15,73), 299(15-17,73),  
 313(15-17,73), 338(15-17,73), 417(14-17),  
 419(14,16), 423(14-17), 445-446, 448
- Adler, I., 89(50), 129
- Alagona, G.: 288(30), 446; 461(51), 480(51),  
 486
- Al-Khayyal, F. A., 270(21), 446
- Allinger, N. L., 288(42-45), 290(42-43), 447
- Alm, E.: 3(19), 9(19), 28(57), 31(19), 32, 34;  
 36(27), 37(35), 53-55(27,35),  
 57-58(27,35), 61-62(27,35), 71
- Almagro, J. C., 461(52), 486
- Alonso, D. O. V., 139(94), 188
- Altman, R. B., 205(71), 221
- Altschul, S. F.: 108(52), 109(52,54), 112(56),  
 125(59), 129-130; 132(1), 146(170),  
 151(146,182), 186, 190-191
- Alvarez, J. C., 411(204), 455
- Alwyn Jones, T., 134(25), 187
- Amaya, M., 417(236), 425-426(236), 457
- Andersson, L., 293(60), 448
- Androulakis, I. P., 270(15,17-18), 273(15),  
 279(15,17-18), 298(15,18,73),  
 299(15,17-18,73), 304(78),  
 313(15,17-18,73,78,83), 332(83),  
 338(15,17-18,73), 407(183), 414(234),  
 417(15,17-18), 419(234), 423(15,17-18),  
 427(78), 431-434(234), 435(18,247),  
 437(83), 438(83,234), 440(234), 442(78),  
 445-446, 448-449, 454, 457
- Anfinsen, C. B.: 55(88), 63(88), 74; 144(158),  
 190; 267(1), 331(1), 445
- Anfinsen, C. B., 36(3), 58(3), 61(3), 70
- Anliker, M., 412(216), 456
- Appelt, K., 409(194), 455
- Aqvist, J., 461(28), 485
- Argos, P.: 145(164), 190; 217(86), 222;  
 248(38-39), 263; 293(56-57,63), 407(176),  
 448, 454
- Aronsson, G., 29(63), 34
- Artymiuk, P. J., 173(232), 192
- Assa-Munt, N., 347-348(103), 450
- Aszodi, A.: 155(194), 165(194), 191; 206(73),  
 221
- Attwood, T. K., 132(5-6), 186
- Augsburger, J. D., 292(53), 296(53), 299(53),  
 437(53), 447
- Avbelj, F., 199-200(38), 220
- Aviles, F. X., 28(60), 34
- Ayers, D. J., 200(41), 221
- Babajide, A., 79(14-15), 127
- Babcock, A. P., 53(77), 73
- Babe, L. M., 411(204), 455
- Bachman, A., 50(71), 73
- Backovsky, S., 365(153), 393(153), 452
- Bacon, D. J., 410(203), 455
- Bagchi, B., 9(43), 33
- Bahar, I.: 79(29), 128; 201(48), 221; 461(55,61),  
 486
- Bairoch, A.: 132(3), 173(3), 186; 215(84), 222
- Baker, D.: 3(12,14,19), 4(12), 7(12,14),  
 9(12,14,19), 10(12,14), 14-15(12),  
 16(12,14), 24(12), 26(14), 28(57), 29(14),  
 31(19), 32, 34; 36(27), 37(35-37),  
 53-55(27,35-37), 57-58(27,35-37),  
 61-62(27,35-37), 71; 79(26), 128;

- Baker, D.: (*Continued*)  
 173(231), 180(242), 192; 196(13), 200(44),  
 203(63), 211(13), 212(63,79), 220–222;  
 246(30–31), 262–263; 360(108–109), 450;  
 460(3), 461(63), 484, 486
- Baldwin, R. L.: 36(4,11–12), 37(11–12),  
 49(11–12), 53–55(11–12), 57(11–12),  
 58(4,11–12), 61(4,11–12), 70; 267(2),  
 364(122–124,128–129), 445, 451
- Ball, K. D., 398(163–164), 453
- Banavar, J. R., 201(49), 221
- Banerjee, A., 365(147), 452
- Barany, G., 57(93), 74
- Barrell, B. G., 134(28), 187
- Barrett, C., 79(28), 128
- Barrett, J. F., 196(20), 201(20), 220
- Bartels, C., 481(77), 486
- Bartley, L. E., 53(77), 73
- Barton, G. J., 247(35–36), 248(41), 263
- Bashford, D.: 404(166), 453; 461(25,33), 485
- Bassolino-Klimas, D., 204(67), 221
- Bates, P. A.: 79(11), 127; 134(18), 186
- Batt, C. A., 36(19), 53–55(19), 57–58(19),  
 61–62(19), 71
- Baumgaertner, A., 143(150), 190
- Bayley, M. J., 202(58), 221
- Beck, M. E., 132(5–6), 186
- Beck, T. L., 365(152), 452
- Becker, O. M., 268(4), 364(4), 367(4), 378(4),  
 445
- Beger, R. D., 202(57), 221
- Bellott, M., 404(166), 453
- Ben-Naim, A., 293(64), 448
- Ben-Tal, N., 460(13), 484
- Berendsen, H. J. C., 288(41), 344(101), 447, 450
- Berne, B. J., 460(8), 484
- Bernstein, F. C.: 87(47), 129; 146(171),  
 169(171), 173(235), 179(171), 190, 192;  
 224(5–6), 262; 462(69), 486
- Berry, R. S., 365(151–152), 371(158),  
 398(163–164), 452–453
- Betancourt, M. R.: 37(43), 38(47), 39(47,55),  
 53–55(43,47,55), 57–58(43,47,55),  
 64–67(39), 72; 79(39), 93–94(39), 129;  
 157(197), 160(197), 167(197), 184(197),  
 191
- Bicout, D. J., 194(5), 220
- Birkakoti, N., 173(229), 192
- Blackledge, M., 202(60), 205(69), 221
- Blanco, F. J., 364(133,135), 404(135), 451–452
- Blaney, J. M., 408(184), 454
- Blattner, F. R., 153(189), 175(238), 191–192
- Bleasby, A. J., 132(5–6), 186
- Blundell, T. L.: 79(18), 108(18), 128; 155(195),  
 191; 406(172–173), 453
- Böhm, H. J., 413(227–228), 456
- Bohr, H., 49(69), 73
- Bohr, J., 206(74), 221
- Boice, J. A., 34(67)
- Boisbouvier, J., 205(69), 221
- Boisvert, D. C., 64(105), 75
- Bolin, C., 440(249), 457
- Bolton, P. H., 202(57), 221
- Bonneau, R.: 141(128), 180(243), 184(128),  
 189, 191–192; 246(31), 263
- Bono, C., 440(250), 457
- Bonvin, A. M. J. J., 364(144), 452
- Born, M., 461(35), 485
- Bowie, J. U.: 78–80(1), 83(1), 127; 136(50),  
 187
- Braig, K., 64(105), 75
- Branden, C.-I., 172(213), 191
- Braun, W.: 201(50), 205(70), 221; 293(55), 447
- Bray, J. E.: 225(11), 258(11), 261(11), 262;  
 360(119), 451
- Brenner, S. E., 130; 172(211), 191
- Brice, M. D.: 87(47), 129; 224(6), 262
- Bromberg, S.: 37(39), 39–41(39), 44(39),  
 53–55(39), 57–58(39), 72; 139(96), 188
- Brooks, B. R.: 171(207), 191; 288(32), 294(32),  
 404(32), 446
- Brooks, C., 140(118,124–125), 171(124–125),  
 189
- Brooks, C. L.: 197(23), 200(42), 220–221;  
 364(136,143), 452; 461(33), 485
- Brorsson, A.-C., 29(63), 34
- Brown, J., 406(171), 414–415(171), 417(171),  
 426(171), 432(171), 436(171), 453
- Bruccoleri, R.: 171(207), 191; 204(67), 221;  
 288(32), 294(32), 404(32), 446;  
 461(43–44), 485
- Brunak, S., 206(74), 221
- Brünger, A. T.: 201–202(52), 221; 338(95),  
 341(96), 342(95), 346(96), 348(96), 450;  
 461(32), 485
- Brutlag, D. L., 132(7), 186
- Bryant, S. H.: 78(7), 79(10,23), 108(7,52),  
 127–130; 135(35), 136(44), 137(35,56),  
 173(235), 184(56), 187, 192; 224(5), 262;  
 462(69), 486

- Bryngelson, J. D.: 3(16-17), 9(16-17),  
30(16-17), 32; 37(31), 53-55(31),  
57-58(31), 61-62(31), 71; 79-80(39), 129
- Bryson, K., 137(53), 184(53), 187
- Bucciantini, M., 28(59), 34
- Bucher, P.: 132(3), 173(3), 186; 215(84), 222
- Buckle, A. M., 64(113), 75
- Bukatin, M. A., 460(10), 484
- Burgess, A. W., 288(36), 447
- Burke, D. F., 134(19), 186
- Burley, S. K., 305(80), 449
- Bursulaya, B. D., 364(143), 452
- Burton, R. E., 34(64)
- Bussey, H., 134(28), 187
- Bustamante, C., 36(21), 53-55(21), 57-58(21),  
61-62(21), 71
- Bystroff, C.: 173(231), 180(242), 192; 196(13),  
200(44), 203(63), 211(13), 212(63,79),  
220-222; 360(108), 450; 461(63), 486
- Calderone, T. L., 34(64)
- Caldwell, G. W., 196(20), 201(20), 220
- Caldwell, J. W., 294(66), 448
- Calfisch, A., 412(216), 413(231), 456
- Callender, R. H., 36(15), 53-55(15), 57-58(15),  
61(15), 70
- Camacho, C., 38(45-46), 46(46), 53-55(45-46),  
56(45), 57-58(46), 72
- Capaldi, A. P., 34(66)
- Caradonna, J. P., 173(218-219,221), 191
- Carlson, M. J., 204(64), 221
- Carney, D., 406(173), 453
- Carr, R. W., 440(250), 457
- Carrion-Vazquez, M., 36(22,24), 53-55(22,24),  
57-58(22,24), 61-62(22,24), 71
- Carter, E. S., 304(79), 449
- Casari, G.: 224(7), 226-227(7), 262; 461(53),  
486
- Case, D. A.: 204(66), 221; 288(30-31), 446;  
461(33,51), 480(51), 485-486
- Caves, L. S. D., 341(99), 450
- Cerjan, C. J., 365(148), 452
- Chakrabarty, A., 364(124), 451
- Chan, C. K., 36(8), 37(39), 39-41(39),  
53-55(8,39), 57-58(8,39), 61(8), 70, 72
- Chan, H. S.: 2-3(7), 6(7,30), 24(52), 30(7),  
31-33; 36(6), 37(6), 39(6,50), 43(6), 44(6),  
49(6), 53-55(6), 57-58(6), 61(6), 64(102),  
70, 72, 75; 90(51), 129; 139(89-92), 188;  
191(2), 219
- Chan, S. I., 204(64), 221
- Chand, A., 69(125), 76
- Chandonia, J. M., 34(70)
- Chandrasekaran, R., 407(174), 454
- Changeaux, J. P., 65(117), 75
- Chatellier, J., 64(113), 75
- Chen, C. C., 205(71), 221
- Chen, L., 60(112), 64(112), 75
- Cheng, B., 292(52), 447
- Cheng, H., 36(19), 53-55(19), 57-58(19),  
61-62(19), 71
- Cherflis, J., 410(200), 455
- Chiche, L., 461(45), 485
- Chicz, R. M., 406(168), 453
- Chiti, F., 28(59), 34
- Chiu, T., 183(245), 192
- Chomilier, J., 212(80), 222
- Chothia, C.: 79(28), 128, 130; 152(186),  
170(206), 172(213), 191
- Chou, K.-C., 225(9), 262
- Chu, S., 53(77), 73
- Chung, S. Y., 407(178), 454
- Church, B. W., 268(6), 445
- Clamp, M. E., 247(35), 263
- Clark, D. E., 5(28), 32
- Clarke, D. T., 364(127), 451
- Clarke, J.: 28(61), 31(61), 34; 36(23), 37(38),  
53-55(23,38), 57-58(23,38), 61(23,38),  
62(23,38,95), 71, 74
- Clementi, C., 41(59), 73
- Clore, G. M.: 201(52), 202(52,59), 221; 238(22),  
248(22), 262
- Cohen, F. E.: 198(27), 220; 252(43), 263;  
461(45), 485
- Coldren, C. D., 173(218), 191
- Connolly, M. L., 293(54), 408(54,185),  
410(202), 447, 454-455
- Copley, R. R., 135(39), 137(39), 184(39), 187
- Corrales, F. J., 64(104), 67(104), 75
- Cortis, C., 461(34), 485
- Cosgrove, T. P., 36(15), 53-55(15), 57-58(15),  
61(15), 70
- Cota, E.: 28(61), 31(61), 34; 37(38), 53-55(38),  
57-58(38), 61-62(38), 71
- Covell, D. G.: 140(113-114), 189; 409(192),  
454; 461(57,59), 486
- Craik, C. S.: 173(226), 192; 411(204), 455
- Cramer, C., 460(14), 484
- Creighton, T. E., 36(1), 53-54(79-83), 56(91),  
58(1,79-83), 61(1), 70, 73-74

- Crippen, G. M.: 79-80(31), 128; 135(40), 138(61), 187
- Croman, H. T., 79(19), 128
- Crowder, M. W., 173(225), 192
- Cuff, J. A., 247(35-36), 263
- Cullis, P. M., 293(60), 448
- Culot, P., 365(150), 452
- Czaplewski, C.: 143(148), 190; 200(46), 221
- Czerminski, R., 268(5), 364(5), 367(5), 378(5), 445
- Dadlez, M., 57(92), 74
- Daggett, V., 288(39), 341(98), 447, 450
- Dallwig, S., 270(16), 279(16), 299(16), 313(16), 338(16), 417(16), 419(16), 423(16), 445
- Dandekar, T.: 145(164), 190; 217(86), 222
- Danho, W., 440(249), 457
- Darby, N. J., 56(91), 74
- Daser, A., 414(233), 419(233), 457
- Dashevskii, V. G., 140(112), 189
- Dauber-Osguthorpe, P., 288(33), 446
- Daugherty, M. A., 34(64)
- Daura, X., 197(24), 220
- D'Avignon, D. A., 50(70), 73
- Davis, H. L., 365(152), 452
- Davis, M. E., 461(29,31), 485
- Davis, P. C., 413(226), 456
- De Alba, E., 364(134), 451
- Deane, C. M., 134(19), 186
- Debe, D. A.: 10(47), 16(47), 33; 204(64), 221
- Decamp, D. L., 411(204), 455
- De Crombrughe, M., 410(199), 455
- Dejaegere, A., 292(47), 447
- De La Cruz, X., 211(77), 221
- Delarue, M., 407(179), 454
- DeLisi, C., 413(230,232), 456
- DesJarlais, R. L., 411(204-205), 413(205), 455
- Diamond, R., 422(241), 457
- Di Cera, E., 409(191), 454
- Diesenhofer, J., 64(106), 75
- Dill, K. A.: 6(30), 24(51-52), 32-33; 36(6), 37(6,39), 39(6,39,50), 40-41(39), 43(6), 44(6,39), 49(6), 53-55(6,39,50), 57-58(6,39,50), 61(6), 64(102), 70, 72, 74; 90(51), 129; 139(89-96), 188; 191(2), 219; 224(8), 226(8), 228(15), 230(18), 262; 360(110,117-118), 366(156), 450-451, 453; 470(75-76), 486
- Dinner, A.: 2(1,9-11), 3(15), 4(9-11), 6(10-11), 7(9-11,15), 8(11,36-37), 9(10,15), 21-22(15), 25(10-11), 26(1,36), 29(9), 30(9-11,37), 31-33; 37(41), 39(41), 49(41), 53-55(41), 57-58(41), 72; 139(106-107), 189; 364(138), 452
- DiNola, A., 344(101), 450
- Dive, G., 365(150), 452
- Dixon, J. S., 411(205), 413(205,220), 455-456
- Dobson, C. M.: 2(1,5), 26(1,56), 28(59), 31, 34; 37(41), 39(41), 49(41), 53(41,76), 54-55(41), 57-58(41), 72-73
- Doig, A. J., 364(127), 451
- Domany, E.: 79-80(33), 128; 196(16), 199(37), 220
- Domingues, F. S., 137(55), 184(55), 187
- Dominy, B. N.: 172(210), 191; 200(42), 221
- Doniach, S., 138(63), 188
- Doolittle, R. F., 293(61), 448
- Duan, Y.: 37(42), 53-55(42), 57-58(42), 72; 197(25), 220; 341(97), 366(97), 450
- Dunbrack, R. L.: 134(21), 186; 198(27), 220; 404(166), 407(175), 453-454
- Duquerry, S., 410(200), 455
- Dyer, R. B., 36(15), 53-55(15), 57-58(15), 61(15), 70
- Dyson, H. J., 364(125), 451
- Eaton, W. A.: 3(20), 9(20,40-41), 10(20), 16(20), 31(20), 32-33; 36(8,17), 53-55(8,17), 57-58(8,17), 61(8,17), 70; 364(141-142), 452
- Edinger, S. R., 461(34), 485
- Eggert, M., 149(180), 190
- Eisenberg, D.: 78(1), 79(1,24), 80(1), 83(1), 113(58), 127-128, 130; 135(33), 136(48,50), 152(185), 187, 191; 211(78), 222; 293(59), 448; 460-461(16), 484
- Eisenhaber, F., 293(56-57,63), 407(176), 448, 454
- Elber, R.: 40(57), 72; 79(30,32), 80(32), 87(32,45), 88(48), 93(32), 99(30), 106(48), 108(30), 127(48), 128-129; 268(5), 364(5), 367(5), 378(5), 445
- El Masry, N. F., 29(62), 34
- Elofsson, A.: 79(24), 113(58), 128, 130; 134(29), 135(34), 161(34), 165(34), 184(34), 187
- Englander, S. W., 36(13), 53-55(13), 57-58(13), 61(13), 67-68(120), 70, 75
- Erickson, B. W., 109(54), 129
- Etchebest, C., 407(181), 454

- Evans, P. A., 2(5), 31  
 Evanseck, J. D., 341(99), 404(166), 450, 453  
 Eyrich, V. A.: 199(31-32), 220; 224(1-2), 225-227(2), 229(16), 238(2), 241(2), 245(2), 261(16), 262; 338(93), 360(93), 449; 460(7), 484  
 Fairman, R., 34(67)  
 Falk, J. E., 270(21), 446  
 Falquet, L., 215(84), 222  
 Fang, K. S., 36(15), 53-55(15), 57-58(15), 61(15), 70  
 Farber, G. K., 172(214), 191  
 Farber, R., 79(15), 127  
 Farinas, E., 173(224), 192  
 Farr, G. W., 68(123), 76  
 Farztdinov, G., 139(101), 188  
 Feig, M., 157(200), 170(200), 191  
 Fele, L., 199-200(38), 220  
 Felts, A. K.: 199(31), 220; 224(1), 229(16), 261(16), 262; 338(93), 360(93), 449; 460(7), 484  
 Fenton, W. A., 60(127), 64(98), 74, 76  
 Ferguson, N., 34(66)  
 Fernandez, J. M., 36(20,22-24), 53-55(20,22-24), 57-58(20,22-24), 61-62(20,22-24), 68(121), 71, 75  
 Ferrenberg, A. M., 42(63), 73  
 Ferrer, M., 57(93), 74  
 Ferrin, T. E., 408(184), 454  
 Fersht, A.: 2(4), 10(4), 24-26(50), 29(62), 31(50), 31, 33-34; 36(7,18,25-26), 53-55(7,18,25-26), 57-58(7,18,25-26), 61(7,18,25-26), 62(25-26,95), 64(104,113), 65-66(118), 67(104,118), 70-71, 74-75; 194(1), 219; 341(98), 450  
 Fetrow, J. S., 133(8,10,12-13,15), 173(8,10,12,234), 174(8,10,12,15), 175(8,10,15), 176(15), 183(15,244), 185(8,10), 186, 192  
 Fidelis, K.: 134-135(17), 140(127), 186, 189; 226(13), 262; 462(67), 465(67), 474(67), 486  
 Fiebig, K. M.: 24(51-52), 33; 37(39), 39-41(39), 44(39), 53-55(39), 57-58(39), 72  
 Field, M. J., 404(166), 453  
 Finkelstein, A. V.: 9(42), 31(42), 33; 139(99), 170(206), 188, 191; 252(42), 263  
 Finlay, M., 247(35), 263  
 Fischer, D.: 79(24), 113(58), 128, 130; 134(22), 135(34), 152(185), 161(34), 165(34), 172-173(216), 184(34), 187, 191  
 Fischer, S., 404(166), 453  
 Fisher, T., 36(24), 53-55(24), 57-58(24), 61-62(24), 68(121), 71, 75  
 Fitch, W. M., 109(53), 129  
 Fletcher, R., 392(160), 453  
 Floeckner, H., 461(53), 486  
 Flory, P. J., 314(86), 449  
 Floudas, C. A.: 204(65), 221; 270(11,14-20, 271(23), 273(14-15), 279(15-19,23), 298(15,18,73), 299(15-18,73), 304(78), 312(81), 313(15-18,73,78,81,83), 317(23), 332(83), 338(15-18,73,92), 356(104), 360(120-121), 364(130-131), 366(130-131), 370(130-131), 371(131), 378(131), 407(183), 414(234-235), 417(14-18), 419(14,16,234), 423(14-18), 427(78), 431-434(234), 435(18,20,247), 437(83), 438(83,234), 440(234), 442(78), 445-446, 448-451, 453, 457  
 Folkers, G., 414(233), 419(233), 457  
 Ford, M. G., 4(23), 32  
 Fowler, S. B.: 28(61), 31(61), 34; 36(23), 37(38), 53-55(23,38), 57-58(23,38), 61-62(23,38), 71  
 Fox, B. A.: 200(44), 221; 360(108), 450; 461(63), 486  
 Fraser, J. C. M., 152(184), 191  
 Freer, S. T., 409(194), 455  
 Fremont, D. H., 406(169), 417(237), 426(237), 453, 457  
 Friedman, R., 293(62), 448  
 Friesner, R. A.: 198(26), 199(31-32), 201(32), 217(85,87), 220, 222; 224(1-4), 225-227(2), 229(16), 238(2), 241(2), 245(2), 261(16), 262; 338(93), 360(93,111-112), 449-450; 460(7,12,20), 461(20,34,40,42), 462-463(40,42), 464(40), 470(20), 475(20), 478(20), 484-485  
 Frishman, D., 248(38-39), 263  
 Froschauer, R., 461(53), 486  
 Fu, X., 440(250), 457  
 Furtak, K., 60(127), 68(123), 76  
 Furth, P. S., 411(204), 455  
 Galazka, W., 144(156-157), 146(156), 190

- Gallicchio, E., 460(9,15), 461(42), 462(42,70), 463(42), 484–486
- Galztskaya, O. V., 9(42), 31(42), 33
- Gambel, E. J., 112(55), 129
- Gao, J., 404(166), 453
- Gardner, K. H., 173(223), 192
- Gatenby, A. A., 64(111), 75
- Gaub, H. E., 36(20), 53–55(20), 57–58(20), 61–62(20), 71
- Gautel, M., 36(20), 53–55(20), 57–58(20), 61–62(20), 71
- Gay, D. M., 393(162), 453
- Gebeshuber, I. C., 69(125), 76
- Gelatt, C. D., 269(10), 445
- Genest, M., 288(33), 446
- Georgopulos, C., 64(97), 74
- Gerschgorin, S., 273(26), 446
- Gerstein, M., 152(186–187), 172(215), 191
- Gervasoni, P., 68(124), 76
- Ghio, C.: 288(30), 446; 461(51), 480(51), 486
- Ghosh, P.: 417(236), 425–426(236), 457; 461–464(40), 485
- Ghuysen, J. M., 365(150), 452
- Gibrat, J. F., 130
- Gibson, K. D.: 83(42), 129; 195(9), 199(9), 220; 288(38), 290–291(38), 292(52), 293(52,58), 296(72), 299(52), 340(38), 366(155), 369(38), 393(38), 416(38), 417(52), 420(42), 437(42), 447–448, 453
- Gibson, T. J., 148(177), 190
- Gierasch, L., 64(106), 75
- Gill, P. E., 277(28), 299(28), 345(28), 435(28), 446
- Gillmanshin, R., 36(15), 53–55(15), 57–58(15), 61(15), 70
- Gilson, M. K.: 443(251–252), 457; 461(24,29), 485
- Gippert, G. P., 204(66), 221
- Gish, W., 132(1), 186
- Glen, R. C., 413(221), 442(221), 456
- Go, N.: 9(45), 33; 39(49), 40(58), 53–55(49), 57–58(49), 72; 139(69), 188; 292(50), 299(75), 314(84–85), 320(75), 411(84), 447–449
- Gocayne, J. D., 152(184), 191
- Goddard, W. A.: 10(47), 16(47), 33; 204(64), 221; 460(12), 484
- Godzik, A.: 39(54), 40(54), 49(54), 53–55(54), 57–58(54), 72; 78(4), 79(35,38), 93–94(38), 108(4), 127–129; 133(10–11), 136(45), 140(121), 148(45), 153(190), 156(196), 173–175(10–11), 185(10), 186–187, 189, 191; 196(10), 220; 225(10), 262
- Goffeau, A., 134(28), 187
- Goldberg, D., 269(9), 445
- Goldenberg, D. P., 53–54(83), 58(83,94), 62(94), 74
- Goldstein, R. A.: 37(29), 45(66), 47(66), 53–55(29), 57–58(29), 61–62(29), 71, 73; 79(22), 120–121(22), 128
- Goodford, P. J., 411–412(209), 455
- Goodsell, D. S., 412(215), 456
- Gorga, J., 406(171), 414–415(171), 417(171), 426(171), 432(171), 436(171), 453
- Goto, Y., 36(19), 53–55(19), 57–58(19), 61–62(19), 71
- Gottsbacher, K., 461(53), 486
- Govindarajan, S., 45(66), 47(66), 73
- Gradwell, M. J., 206(73), 221
- Graham, W. H., 304(79), 449
- Grantcharova, V. P.: 28(57), 34; 37(35), 53–55(35), 57–58(35), 61–62(35), 71; 460(3), 484
- Granzier, H. L., 36(21), 53–55(21), 57–58(21), 61–62(21), 71
- Green, S. M., 409(193), 455
- Greenstadt, J., 392(161), 453
- Gregoret, L. M., 461(45), 485
- Griffin, R. G., 202(55), 221
- Grindley, H. M., 173(232), 192
- Gronenborn, A. M., 201(52), 202(52,59), 221
- Gront, Dd., 145–146(168), 190
- Grootenhuis, P. D.: 196(11), 220; 408(187), 454
- Grosberg, A. Y., 36–37(9), 49(9), 53–55(9), 57–58(9), 61(9), 70
- Groscurth, P., 68(124), 76
- Gross, J. D., 202(55), 221
- Groth, M., 200(46), 221
- Gulukota, K.: 64(115), 75; 414(232), 456
- Gunn, J. R.: 198(26), 199(29,39–40), 201(39), 206(72), 212(40), 217(85,87), 220–222; 224(3–4), 246(4), 262; 360(112), 450; 460–461(20), 470(20), 475(20), 478(20), 485
- Güntert, P.: 205(70), 221; 338(94), 342(94), 353(94), 356(94), 359(94), 450
- Guo, H., 404(166), 405(170), 453
- Guo, Q., 145(165), 190
- Guo, Z., 44(65), 73

- Gutin, A. M.: 3(18), 6(29), 7(35), 8(29,38-39),  
30(18), 32–33; 39(52), 53-55(52),  
57-58(52), 64(101), 72, 74;  
139(99,101-103), 188
- Ha, S., 404(166), 453
- Ha, T., 53(77), 73
- Haak, J. R., 344(101), 450
- Haber, E., 267(1), 331(1), 445
- Hagler, A. T.: 138(62), 187; 288(33), 446
- Halfon, S., 173(226), 192
- Hammer, J., 440(249), 457
- Hammill, S. J.: 28(61), 31(61), 34; 37(38),  
53-55(38), 57-58(38), 61-62(38), 71
- Hammond, G. S., 7(34), 29(34), 33
- Hamprecht, F. A., 211(76), 221
- Han, K. F., 173(231), 192
- Haneef, I., 406(173), 453
- Hansen, J., 206(74), 221
- Hansma, H. G., 69(125), 76
- Hansma, P. K., 69(125), 76
- Hansmann, U. H. E.: 144(154-155),  
145(166-167), 190; 325(91), 364(126), 449,  
451
- Hao, M.-H.: 139(108-110), 144(108-110),  
145(108-110,161), 189–190; 199(30), 220;  
233(20), 262; 460(4), 484
- Hart, T. N., 412(217-218), 456
- Hashimo, M., 36(19), 53-55(19), 57-58(19),  
61-62(19), 71
- Haussler, D., 79(28), 128
- Hawkins, G., 460(14), 484
- Hawley, R. C., 461-463(37), 485
- Hazout, S., 407(181), 454
- Head, R. D., 409(193), 455
- Hegde, R., 64(105), 75
- Hegyi, H., 172(215), 191
- Hendlich, M., 461(53), 486
- Hendrickson, W. A.: 417(237), 426(237), 457;  
461-463(37-38), 485
- Henikoff, J. G., 132(4), 148(172), 175(236-237),  
176(236), 177(236-237), 183(236,246),  
185(236,246), 186, 190, 192
- Henikoff, S., 132(4), 148(172), 175(236-237),  
176(236), 177(236-237), 183(236),  
185(236), 186, 190, 192
- Henry, E. R.: 9(41), 33; 364(141-142), 452
- Hermans, J.: 225(12), 262; 460(23), 461(52),  
485–486
- Herrier, M., 36(2), 58(2), 61(2), 70
- Herschlag, D., 53(77), 73
- Hertz, J., 4(25), 32
- Hicks, R. P., 304(79), 449
- Higelin, J., 440(249), 457
- Higgins, D. G., 148(177), 190
- Hinds, D. A.: 79(36), 93-94(36), 128; 87(43),  
129; 140(115), 142(143), 189–190;  
360(105), 450; 465(73-74), 486
- Hirata, F.: 292(50), 447; 461(36), 462(68),  
485–486
- Hoang, L., 36(13), 53-55(13), 57-58(13), 61(13),  
70
- Hobohm, U., 233(21), 262
- Hofacker, I. L., 79(14-15), 127
- Hoffmann, D., 139(66-67), 188
- Hofmann, K.: 132(3), 173(3), 186; 215(84), 222
- Hofrichter, J.: 9(40-41), 33; 36(8,17),  
53-55(8,17), 57-58(8,17), 61(8,17), 70;  
364(141-142), 452
- Hollinger, F. P., 461-462(39), 485
- Holm, L.: 87(44), 105(44), 120(44), 129;  
407(180), 454; 460-462(17), 465(17),  
472-474(17), 483(17), 485
- Holtzer, A., 50(70), 73
- Holtzer, M. E., 50(70), 73
- Honda, S., 364(139), 452
- Hong, M., 202(55), 221
- Honig, B.: 134(20), 138(62), 186–187; 194(4),  
220; 292(51), 293(62), 360(111),  
443(251-253), 447–448, 450, 457;  
460(11,13), 461(11,24,27,30,38), 483(79),  
484, 486
- Hopfield, J. J., 4(24), 32
- Hopfinger, A. J., 296(68), 448
- Horovitz, A., 64(109), 65(109,116), 66(116), 75
- Horst, R., 270(12-13), 442(12), 445
- Horwich, A. L., 60(127), 64(98,105,107),  
65(107), 68(107,123), 74–76
- Howe, J., 413(223), 456
- Hu, W., 202(55), 221
- Hu, W.-P., 141(134-135), 189
- Huang, B. S., 34(64)
- Huang, E. S.: 79(13,26), 127–128;  
142(142,144-145), 157(201), 184(142),  
190–191; 199(28), 199(34-36),  
204(35-36), 220; 246(30), 262; 462(65-66),  
465(72), 470(65-66), 475(66), 486
- Huang, G. S., 36(16), 53-55(16), 57-58(16),  
61(16), 70
- Hubbard, S. J., 293(63), 448

- Hubbard, T.: 79(28), 128, 130; 134-135(17), 140(127), 172(211), 186, 189, 191; 225(11), 226(13), 258(11), 261(11), 262; 360(119), 451; 462(67), 465(67), 474(67), 486
- Huber, T., 200(41), 221
- Hughey, R., 79(28), 128
- Hunt, J. F., 64(106), 75
- Hus, J.-C., 202(60), 221
- Hutchinson, K., 139(94), 188
- Hwang, J. K., 407(182), 454
- Ierapetritou, M. G., 313(83), 332(83), 407(183), 414(234), 419(234), 431-434(234), 437(83), 438(83,234), 440(234), 449, 454, 457
- Ilkowski, B.: 135(32), 142(140), 144(153), 157(199), 161-162(199), 187, 189-191; 200-201(45), 221
- Inman, J., 79(15), 127
- Itzhaki, L. S.: 29(62), 34; 36(26), 52-55(26), 57-58(26), 61-62(26), 71
- Jackson, S. E.: 3(13), 9(13), 11-16(13), 24(13), 32; 37(28), 53-55(28), 57-59(28), 61-62(28), 71
- Jaeger, E. P., 412(222), 456
- Jain, A., 342(100), 409(195), 450, 455
- James, R., 34(66)
- Janin, J., 410(197-199), 455
- Jardetzky, T., 406(171), 414-415(171), 417(171), 426(171), 432(171), 436(171), 453
- Jaritz, M., 137(55), 184(55), 187
- Jaroszewski, L.: 149-151(181), 152(183), 156(196), 157(198), 161(181), 180(241), 191-192; 196(10), 220
- Jarrold, M. F., 367(157), 371(157), 453
- Jaun, B., 197(24), 220
- Jean-Charles, A., 461(38), 485
- Jennings, P. A., 41(59), 73
- Jernigan, R. L.: 39(53), 40(53), 53-55(53), 57-58(53), 72; 79(29,34), 93-94(34), 128; 140(114), 189; 201(48), 221; 409(192), 454; 461(55-56,58-59), 486
- Jiang, F., 411(208), 455
- Jimenez, M. A., 364(134), 451
- Joachimiak, A., 64(105), 75
- Johnson, M. S., 79(18), 108(18), 128
- Jones, D. T.: 78(2), 79(9), 83(2), 127; 134(31), 135(38,42), 136(42), 137(53), 141(132), 153(188), 184(53), 187, 189, 191; 196(22), 220; 246-247(26), 262; 460(2), 484
- Jones, G., 202(58), 221
- Jones, G. R., 364(127), 413(221), 442(221), 451, 456
- Jones, S., 172(212), 191
- Jonsson, B.-H., 29(63), 34
- Jordan, K. D., 365(145), 370(145), 392(145), 452
- Jorgensen, P., 365(146), 452
- Jorgensen, W. L.: 288(29), 408(29), 446; 462(64), 486
- Joseph-McCarthy, D., 404(166), 453
- Judson, R. S., 412(222), 456
- Juffer, A. H., 293(63), 448
- Kabsch, W.: 14-15(69), 34; 161(205), 170(205), 191; 231(19), 262; 422(243-244), 457
- Kang, H. S., 203(62), 221
- Kang, Y. K., 296(69-72), 448
- Kappler, J., 417(237), 426(237), 457
- Karlin, S.: 112(56), 129; 173(233), 192
- Karplus, M.: 2(1-3,6,9-11), 3(2-3,6,9-11,15), 4(9-11), 6(6,10-11), 7(2,6,9-11,15), 8(10-11,36-37), 9(10,15), 10(48-49), 21-22(15), 25(10,54), 26(1,36,56), 29(9), 30(2,6,9-11,37,49), 31-34; 37(30,41), 39(41), 49(41), 53-55(30,41), 57-58(30,41), 61-62(30), 71-72; 79(28), 128; 139(97-98,106-107), 161(203), 188-189, 191; 200(43), 201-202(52), 221; 268(4,8), 288(32), 292(47), 294(32), 341(99), 364(4,138), 367(4), 378(4), 404(32,165-166), 405(165), 407(175), 413(229,231), 445-447, 450-454, 456; 460(6,21-22), 461(22,25,43), 469(22), 481(77), 483(6,22,78), 484-486
- Kashi, Y., 60(127), 76
- Kasuya, A., 173(217), 191
- Kawabata, T., 137(54), 184(54), 187
- Kay, B. K., 347(102), 450
- Kazimerkiewicz, R.: 143(148), 190; 200(46), 221
- Kearsley, S. K., 411(213-214), 456
- Kellermayer, M. S. F., 36(21), 53-55(21), 57-58(21), 61-62(21), 71
- Kelley, L. A., 79(11), 127
- Kennard, O.: 87(47), 129; 224(6), 262

- Kiefhaber, T., 50(71), 53(74), 73  
 Kihara, D., 137(57), 147-148(57), 175(57), 184(57), 187  
 Kim, P. S.: 55(84-87), 57(84,87,92), 74; 267(2), 364(129), 445, 451  
 Kim, S.-H.: 201(51), 221; 411(208), 455  
 Kindt, J. H., 69(125), 76  
 King, P. M., 409(190), 454  
 King, R. D., 248(37), 263  
 Kinjo, A. R., 137(54), 184(54), 187  
 Kirchhausen, T., 68(123), 76  
 Kirkpatrick, S., 269(10), 445  
 Kirnarsky, L., 201(53), 221  
 Kitao, A., 292(50), 447  
 Kitchen, D. B., 462(68), 486  
 Kleanthous, C., 34(66)  
 Klemba, M., 173(222-223), 192  
 Klepeis, J. L., 312(81,83), 313(83), 338(92), 347-348(103), 360(120), 414(235), 449-451, 457  
 Klepsis, J. L., 204(65), 221  
 Klevit, R. E., 212(79), 222  
 Kleywegt, G. J., 134(25), 173(228), 187, 192  
 Klimov, D. K.: 7(32-33), 33; 36(10), 37(10,32,34,43-44), 38(44), 39(32,34), 40(32), 41-42(32,60), 44(10), 45(44), 49(10,44), 52(10,32,34), 53(10,32,34,43-44,78), 54-55(10,32,34,43-44), 56(90), 57-58(10,32,34,43-44), 61(10,32,34), 62(32,34), 68(122), 70-74, 76; 79-80(40), 129  
 Kloiber, K., 202(56), 221  
 Knapp, E. W., 139(66-67), 188  
 Knegt, R. M., 196(11), 220  
 Kobayashi, N., 364(139), 452  
 Kocher, J. P. A., 226(14), 262  
 Koehl, P.: 157(201), 191; 199(28), 220; 407(179), 454  
 Koetzle, T. F.: 87(47), 129; 146(171), 169(171), 179(171), 190; 224(5-6), 262; 462(69), 486  
 Kofke, D., 462(68), 486  
 Kolinski, A.: 39(54), 40(54), 49(54), 53-55(54), 57-58(54), 72; 78(4), 79(27,35,38), 93-94(38), 108(4), 127-129; 135(32), 136(45), 139(72-84,111), 140(75-84,116-126), 141(122-123,133-138), 142(133,139-140), 144(116,152-153,156-157), 145(168), 146(156,168), 148(45), 149(178), 151(178), 152(183), 153(191,193), 154-155(133), 157(139,198-200), 158(202), 161-162(199), 167(202), 170(200), 171(124-125), 172(209-210), 174(191,193), 182(139), 183(244), 184(133), 187-192; 196(18-19), 199(33), 200(42,45), 201(19,45), 203(18,61), 207(75), 209(18,61), 215(83), 220-222; 225(10), 246(27-28,32), 262-263; 360(106-107), 450; 461(50), 486  
 Kollman, P. A.: 37(42), 53-55(42), 57-58(42), 72; 138(61), 187; 197(25), 220; 288(30-31), 292(48), 294(66), 341(97), 366(97), 408(187), 409(189), 446-448, 450, 454; 461(45,51), 480(51), 485-486  
 Kominos, D., 202(54), 221  
 Komoriya, A., 139(70-71), 188  
 Konrat, R., 202(56), 221  
 Koonin, E. V., 146(170), 151(170), 190  
 Kooperberg, C.: 200(44), 221; 246(30-31), 262-263; 360(108), 450; 461(63), 486  
 Koppensteiner, W. A., 137(55), 184(55), 187  
 Kopple, K. D., 303(76), 449  
 Koretke, K. K., 135(39,43), 137(39), 184(39), 187  
 Kortemme, T., 364(132), 451  
 Kostrowicki, J., 145(160), 190  
 Krigbaum, W. R., 139(70-71), 188  
 Krogh, A., 4(25), 32  
 Krystek, S. R., 204(67), 221  
 Kuchnir, L., 404(166), 453  
 Kuczera, K., 404(166), 453  
 Kuhlman, B., 34(65, 67)  
 Kunst, F., 176(239), 192  
 Kuntz, I. D.: 138(60-61), 187; 408(184), 411(204-207,211), 413(205,220), 454-456  
 Kunz, R. E., 371(158), 453  
 Kurochkina, N. A., 203(62), 221  
 Kussel, E., 199(37), 220  
 Kuszewski, J., 238(22), 248(22), 262  
 Kuwata, K., 36(19), 53-55(19), 57-58(19), 61-62(19), 71  
 Kyte, J., 293(61), 448  
 Lackner, P., 461(53), 486  
 Ladurner, A. G., 36(16), 53-55(16), 57-58(16), 61(16), 70  
 Lam, C. F., 178-179(240), 192  
 Lambris, J. D.: 204(65), 221; 338(92), 347(102-103), 348(103), 449-450

- Lander, E. S., 135(36), 187  
 Landgridge, R., 408(184), 454  
 Landry, S. J., 64(97,106), 74–75  
 Lansbury, P. T., 36(14), 53–55(14), 57–58(14), 61(14), 70  
 Lapedes, A. S., 79(15), 127  
 Laskowski, R. A., 173(227), 192  
 Lathrop, E. J. P.: 217(85), 222; 360(112), 450; 460–461(20), 470(20), 475(20), 478(20), 485  
 Lathrop, R. H.: 79(20–21), 103(21), 128; 134(30), 136(30), 175(30), 177(30), 187  
 Lau, F. T. K., 404(166), 453  
 Lavery, R., 407(181), 454  
 Lawrence, C. E.: 78(7), 108(7), 127; 136(44), 187  
 Lawrence, M. C., 413(226), 456  
 Lazaridis, T.: 200(43), 221; 364(138), 404–405(165), 452–453; 460(6,22), 461(22), 469(22), 483(6,22,78), 484–486  
 Leach, A. R., 411(206), 455  
 Lee, B.: 203(62), 221; 408(186), 454  
 Lee, J.: 142(146), 143(147), 184(142), 190; 195(9), 199(9), 220; 241(25), 244(25), 258(25,45), 262–263; 360(113–114), 451  
 Lee, J. Y., 360(113,115), 365(115,153–154), 393(115,153–154), 451–452  
 Lee, M., 171(208), 191  
 Lee, R. H., 410(201), 455  
 Le Grand, S., 79(24), 128  
 Leiserson, C. E., 79(19), 128  
 Lemak, A. S., 199(29), 220  
 Lengauer, T.: 136(51), 187; 196(14), 211(14), 220  
 Leo, G. C., 196(20), 201(20), 220  
 Leopold, P., 268(7), 445  
 Lesk, A. M., 172(213), 191  
 Levinthal, C.: 36(5), 43(5), 53–55(5), 57–58(5), 61(5), 70; 268(3), 445  
 Levitt, M.: 79(13,36), 87(43), 93–94(36), 127–129; 138(58–59), 140(115), 142(143–144), 157(201), 187, 189–191; 199(28,34), 220; 288(40), 360(40,105), 447, 450; 461(60), 462(60,65–66), 464(60,71), 468–469(60), 470(60,65–66), 465(72–74), 475(60,66), 486  
 Levy, R. M.: 202(54), 221; 460(9,15), 461(36,42), 462(42,68,70), 463(42), 484–486  
 Li, A. J., 341(98), 450  
 Li, H., 36(23), 47(67), 49(67), 53–55(23), 57–58(23), 61–62(23), 71, 73  
 Li, W.: 180(241), 192; 196(15), 220; 461(48), 485  
 Li, Z.: 134(16), 145(16,162), 186, 190; 304(77), 318(77), 449  
 Li, Z. Q., 239(23), 262  
 Liao, W. F., 407(182), 454  
 Lidner, P., 68(124), 76  
 Lii, J.-H., 288(43–45), 290(43), 447  
 Lijnzaad, P., 293(56), 448  
 Lin, S. F., 139(71), 172–173(216), 188, 191  
 Lingard, Per-Anker, 49(69), 73  
 Linial, N., 79–80(32), 87(32), 93(32), 128  
 Lipman, D. J., 112(57), 125(59), 129–130  
 Liu, X., 411(210), 455  
 Livingstone, D. J., 4(26), 32  
 Livingstone, J., 4(23), 32  
 Liwo, A.: 79(12), 127; 142(146), 143(147–149), 184(142), 190; 195(9), 199(9), 200(46), 220–221; 241(25), 244(25), 258(25,45), 262–263; 360(113–114), 366(155), 451, 453  
 LoConte, L.: 225(11), 258(11), 261(11), 262; 360(119), 451  
 Lorimer, G. H., 63(96), 64(99,103,110–111), 65(110), 67(103,120), 68(99,120), 69(103), 74–75  
 Loughney, D. A., 196(20), 201(20), 220  
 Lovett, E. G., 50(70), 73  
 Lu, H., 147(204), 169(204), 191  
 Lund, O., 206(74), 221  
 Luque, F. J., 460(18), 485  
 Luthey-Schulten, Z. A.: 37(29,33), 53–55(29,33), 57–58(29,33), 61–62(29,33), 71; 79(22), 120–121(22), 128; 135(43), 187  
 Luthy, R.: 78–80(1), 83(1), 127; 136(50), 187  
 Luty, B. A., 461(29), 485  
 Ma, B., 364(140), 452  
 Ma, J., 64(108), 75  
 MacCallum, R. M., 79(11), 127  
 Macias, M. J., 196(21), 205(21), 220  
 Mackay, A. L., 422(242), 457  
 MacKerell, A. D., 404(166), 453  
 Madden, T. L.: 125(59), 130; 151(182), 191  
 Madej, T., 130  
 Madison, V., 303(76), 449  
 Madziar, P., 139(111), 189  
 Magherini, F., 28(59), 34

- Maigret, B., 292-293(52), 299(52), 417(52), 420(42), 437(52), 447
- Maiorov, V. N.: 79-80(31), 128; 135(40), 187
- Major, F., 218(88), 222
- Malpass, J. A., 4(23), 32
- Manallack, D. T., 4(26), 32
- Marahiel, M. A., 36(2), 58(2), 61(2), 70
- Maranas, C. D., 270(15,18-20), 271(23), 273(15), 279(15,18-19,23), 298-299(15,18), 304(78), 313(15,18,78), 317(23), 338(15,18), 417(15,18), 423(15,18), 427(78), 435(18,20,247), 442(78), 445-446, 449, 457
- Marchler-Bauer, A.: 79(10), 127; 135(35), 137(35,56), 184(56), 187
- Marino, S., 173(223), 192
- Marion, D., 202(60), 205(69), 221
- Maritan, A.: 196(12), 212(12), 220; 201(49), 221
- Mark, A. E., 197(24), 220
- Marqusee, S., 364(128), 451
- Marrack, P., 4171(237), 426(237), 457
- Marshall, C. H., 224(3), 262
- Marshall, G. R., 409(193), 455
- Marszalek, P. E., 36(22,24), 53-55(22,24), 57-58(22,24), 61-62(22,24), 68(121), 71, 75
- Marten, B., 460(12), 484
- Martin, J. L., 41(61), 73
- Martinez, J. C., 28(58,60), 34
- Masuya, M., 325(91), 449
- Matagne, A., 53(76), 73
- Matar, O. G., 178-179(240), 192
- Mathiowetz, A., 412(222), 456
- Matsumura, M., 406(169), 453
- Matsuo, Y.: 78(7), 127; 135(37), 173(37), 187
- Matthews, B. W., 422(239), 457
- Matthews, J. M., 29(62), 34
- Mattos, C., 404(166), 453
- Maxwell, D. S., 462(64), 486
- Mayne, L., 36(13), 53-55(13), 57-58(13), 61(13), 70
- Mazo, R. M., 293(64), 448
- McCallister, E. L., 36(27), 53-55(27), 57-58(27), 61-62(27), 71
- McCallum, C. M., 183(246), 185(246), 192
- McCammon, J. A.: 292(49), 447; 461(29,31), 485
- McCormick, G. P., 270(22), 446
- McDermott, A. E.: 199(31), 217(87), 220, 222; 224(4), 246(4), 229(16), 261(16), 262; 338(93), 360(93), 449
- McDonnell, P. A., 196(20), 201(20), 220
- McGuire, R. F., 288(34,36), 290(46), 446-447
- McLachlan, A. D.: 422(245-246), 457; 460-461(16), 484
- Meirovitch, E., 321(88), 449
- Meirovitch, H., 321(88-89), 449
- Melius, C., 412(222), 456
- Meller, J., 87(45), 88(48), 106(48), 127(48), 129
- Mellins, E., 417(236), 425-426(236), 457
- Meng, E. C., 411(211), 455
- Meszaros, C. S., 89(49), 129
- Metropolis, N., 41(62), 73
- Metzler, W. J., 204(67), 221
- Meyer, E. F.: 87(47), 129; 224(6), 262
- Micheletti, C., 196(12), 212(12), 220
- Michie, A. D., 172(212), 191
- Michnick, S., 404(166), 453
- Milik, M., 139(81,84), 140(81,84), 188
- Miller, M. D., 411(213-214), 456
- Miller, R. T., 134(31), 187
- Miller, W.: 125(59), 130; 132(1), 186
- Miller, W. H., 365(148), 452
- Milner-White, E. J., 50(126), 54(125), 60(126), 76
- Miranker, A., 413(229,231), 456
- Mirny, L. A.: 40(56), 72; 78(8), 127
- Miyamoto, S., 409(189), 454
- Miyazawa, D., 39(53), 40(53), 53-55(53), 57-58(53), 72
- Miyazawa, S.: 79(34), 93-94(34), 128; 461(56,58), 486
- Mohan, V., 461(31), 485
- Mohanty, D.: 172(209-210), 191; 200(42), 221
- Moller, M. F., 5(27), 32
- Momany, F. A., 288(34-36), 290(46), 446-447
- Monge, A.: 217(85), 222; 224(3), 262; 360(111-112), 450; 460-461(20), 470(20), 475(20), 478(20), 485
- Monod, J., 65(117), 75
- Monos, D. S., 407(183), 414(234), 419(234), 431-434(234), 438(234), 440(234), 454, 457
- Montal, M., 268(7), 445
- Monteiro, R. D. C., 89(50), 129
- Montelione, G. T., 204(67), 221
- Moon, J. B., 413(223), 456
- Mori, E., 412(222), 456

- Morikis, D.: 204(65), 221; 338(92), 347-348(103), 449-450
- Mornon, J.-P., 212(80), 222
- Mortenson, M. E., 229-230(17), 262
- Moszer, I., 176(239), 192
- Moult, J.: 7(31), 33; 134(17,26), 135(17), 137(26), 139(68), 140(127), 145(68), 186-189; 194(6), 220; 226(13), 262; 410(203), 455; 461(62), 462(67), 465(67), 470(62), 474(67), 475(62), 486
- Mumenthaler, C.: 205(70), 221; 338(94), 342(94), 353(94), 356(94), 359(94), 450
- Munekata, E., 364(139), 452
- Muoz, V.: 3(20), 9(20,40-41), 10(20), 16(20), 31(20), 32-33; 36(8,17), 53-55(8,17), 57-58(8,17), 61(8,17), 70; 364(141-142), 452
- Munro, R. E., 79(41), 129
- Murcko, M. A., 409(195), 413(224-225), 455-456
- Murphy, R., 460(12), 484
- Murray, W., 277(28), 299(28), 345(28), 435(28), 446
- Murtagh, B., 277(27), 446
- Murzin, A. G., 130; 136(52), 172(211), 187, 191; 259(46), 261(46), 263
- Nagarajaram, H. A., 134(19), 186
- Nagy, Z. A., 440(249), 457
- Nayak, N. N., 414(234), 419(234), 431-434(234), 438(234), 440(234), 457
- Nayeem, A., 292-293(52), 299(52), 417(52), 420(42), 437(52), 447
- Needleman, S. B.: 79(16), 108(16), 128; 136(49), 149(49), 187
- Nemethy, G.: 83(42), 129; 225(9), 262; 288(37-38), 293(65), 296(69-72), 321(87), 325(90), 447-449
- Neumaier, A., 273(25), 446
- Nevill-Manning, C. G., 132(7), 186
- Ngo, T., 404(166), 453
- Nguyen, D., 288(31), 404(166), 446, 453
- Nguyen, V. H., 365(150), 452
- Nicholls, A.: 293(62), 448; 460(12), 461(38), 484-485
- Nieba-Axmann, S. E., 66-67(119), 75
- Niederer, P., 412(216), 456
- Nieto, J. L., 364(134), 452
- Nilges, M., 196(21), 205(21,68), 220-221
- Nishikawa, K.: 78(7), 127; 135(37), 173(37), 187
- Nogut, T., 299(75), 320(75), 448
- Novotny, J.: 409(196), 455; 461(43-44), 485
- Nussinov, R., 364(140), 452
- Oas, T. G., 34(64); 36(16), 53-55(16), 57-58(16), 61(16), 70
- Oatley, S. J., 408(184), 454
- Oberhauser, A. F., 36(22-24), 53-55(22-24), 57-58(22-24), 61-62(22-24), 71
- O'Donoghue, S. I., 196(21), 205(21), 220
- Oesterheld, F., 36(20), 53-55(20), 57-58(20), 61-62(20), 71
- Ogasawara, N., 176(239), 192
- Ogiwara, A., 148(173), 190
- Okamoto, Y.: 144(154-155), 145(166-167), 190; 325(91), 364(126), 449, 451
- Olafson, B.: 171(207), 191; 288(32), 294(32), 404(32), 446
- Oldziej, S.: 79(12), 93(12), 127; 200(46), 221
- Olmea, O., 196(17), 220
- Olson, A. J., 412(215), 456
- O'Neal, D., 365(149), 452
- Onuchic, J. N.: 2-3(8), 6(8), 24(53), 30(8), 32-33; 37(31,33), 39-40(51), 41(59), 42(51), 53-55(31,33,51), 57-58(31,33,51), 61-62(31,33), 71-73; 194(3), 220; 268(7), 445
- Oobatake, M., 293(65), 448
- Ooi, T., 293(65), 448
- Oprea, T. I., 409(193), 455
- Orengo, C. A.: 172(212), 191; 225(11), 258(11), 261(11), 262; 360(119), 451
- Oresic, M., 268(6), 445
- Orr, W. J. C., 38(48), 53-55(48), 57-58(48), 72
- Ortiz, A. R.: 79(27), 128; 141(133-138), 142(133,137), 149(178), 151(178), 153(191-193), 154-155(133), 158(202), 167(202), 171(137,208), 174(193), 184(133), 189-191; 196(18-19), 201(19), 203(18), 209(18), 220; 202(61), 207(75), 209(61), 221; 246(28,32), 262-263; 360(106-107), 450
- Ortiz de Montellano, P. R., 411(204), 455
- Osapay, K., 461(33), 485
- Oschkinat, H., 196(21), 205(21), 220
- Osguthorpe, D. J.: 142(141), 184(141), 189; 194-195(7), 220; 256(44), 263; 288(33), 446; 460(5), 484

- Oshiro, C. M., 413(220), 456  
 Ota, M., 137(54), 184(54), 187  
 Ottinger, M., 66-67(119), 75  
 Otwinowski, Z., 64(105), 75  
 Otzen, D. E.: 29(62), 34; 36(26), 52-55(26), 57-58(26), 61-62(26), 71  
 Ouzounis, C.: 78(5), 127; 148(174), 190  
 Overington, J. P., 79(18), 108(18), 128  
 Ozkan, B., 461(61), 486  
 Ozment, J., 365(146), 452
- Paci, E., 26(56), 34  
 Palmer, K. A.: 83(42), 129; 288(38), 290-291(38), 292-293(52), 299(52), 340(38), 369(38), 393(38), 416(38), 417(52), 420(52), 437(52), 447  
 Palmer, R. G., 4(25), 32  
 Pan, T., 53(75), 73  
 Panchenko, A. R.: 79(10), 127; 135(35), 137(35,56), 184(56), 187  
 Pande, V. S.: 36-37(9), 49(9), 50(72), 53-55(9), 57-58(9), 61(9), 70, 73; 364(137), 452  
 Papadopoulos, D., 440(249), 457  
 Pappu, R. V.: 43-44(64), 73; 199(28), 220  
 Pardalos, P. M.: 270(12), 414(235), 442(12), 445, 457; 411(210), 455  
 Parisien, M., 218(88), 222  
 Park, B.: 142(144), 190; 461(60), 462(60,66), 464(60), 468-469(60), 470(60,66), 475(60,66), 486  
 Park, J., 79(28), 128  
 Paterlini, G.: 83(42), 129; 288(38), 290-291(38), 340(38), 369(38), 393(38), 416(38), 447  
 Pawlowski, K., 133(14), 156(196), 174(14), 183(14), 186, 191  
 Pearson, W. R.: 112(57), 129; 132(2), 148(175-176), 186, 190  
 Pedersen, J. T.: 139(68), 145(68), 188; 226(13), 262; 462(67), 465(67), 474(67), 486  
 Peitsch, M., 218(88), 222  
 Perrett, S., 65-67(118), 75  
 Perrot, G.: 292(52), 294(67), 447-448; 461(47), 485  
 Peterson, P. A., 406(169), 453  
 Petrey, D., 483(79), 486  
 Petrokovski, S., 175(236-237), 176(236), 177(236-237), 183(236,246), 185(236,246), 192  
 Petsko, G. A.: 172(214), 191; 305(80), 449  
 Pettit, B. M., 460(19), 461(31), 485
- Phillips, A. T., 360(118), 366(156), 451, 453  
 Piela, L., 145(160), 190  
 Pietrasanta, L. I., 69(125), 76  
 Pillardy, J.: 195(9), 199(9), 220; 241(25), 244(25), 258(25,45), 262-263; 360(113-114), 366(155), 451, 453  
 Pincus, M. R.: 79(12), 93(12), 127; 200(46), 221  
 Pinto, A. L., 173(219), 191  
 Plaxco, K. W.: 3(12,14), 4(12), 7(12,14), 9-10(12,14), 14-15(12), 16(12,14), 24(12), 26(14), 29(14), 32; 37(37), 53-55(37), 57-58(37), 61-62(37), 71; 460(3), 484  
 Pluckthun, A., 66-67(119), 68(124), 75-76  
 Plunkett, G., 153(189), 175(238), 191-192  
 Podlogar, B. L., 196(20), 201(20), 220  
 Poirrette, A. R., 173(232), 192  
 Ponder, J. W.: 142(145), 190; 199(28,35-36), 204(35-36), 220; 405(167), 453  
 Ponting, C. P., 183(247), 192  
 Postma, J. P. M., 344(101), 450  
 Potterton, L., 134(24), 137(24), 161(203), 187, 191  
 Pottle, M. S.: 225(9), 262; 288(37), 325(90), 447, 449  
 Powell, M. J. D., 392(160), 453  
 Prodhom, B., 404(166), 453  
 Profeta, S.: 288(30), 446; 461(51), 480(51), 486
- Qiu, D., 461-462(39), 485  
 Quiocho, F. A., 408(188), 454
- Rabow, A. A., 145(163), 190  
 Rackovsky, S.: 79(12), 93(12), 127; 200(46), 221; 360(115), 365(115), 393(115), 451  
 Radford, S. E.: 2(5), 31, 34(66); 53(76), 73  
 Rajagopal, P., 212(79), 222  
 Raleigh, D. P., 34(65, 67-68)  
 Ramachandran, G. N., 407(174), 454  
 Ramirez-Alvarado, M., 364(132-133), 451  
 Ranson, N. A., 68(123), 76  
 Rao, S. T., 422(240), 457  
 Rapp, C. S., 461-464(40), 485  
 Rashin, A. A., 460(10), 461(26,44), 484-485  
 Ratschek, H., 273(24), 446  
 Read, R. J., 412(217-218), 456  
 Recabarren, R., 45(66), 47(66), 73  
 Regan, L., 173(222,224), 192  
 Reiher, W. E., 404(166), 453  
 Rejferm, P., 461(36), 485  
 Remington, S. J., 422(239), 457

- Reva, B. A., 252(42), 263  
 Rey, A., 144(151), 190  
 Reynolds, C. A., 409(190), 454  
 Rice, D. W.: 79(24), 113(58), 128, 130; 135(34), 161(34), 165(34), 184(34), 187; 211(78), 222  
 Rice, L. M., 338(95), 342(95), 450  
 Richards, F. M.: 173(220-221), 191; 408(186), 454  
 Richards, W. G., 409(190), 454  
 Richardson, A., 64(97), 74  
 Richter, M., 69(125), 76  
 Rick, S. W., 460(8), 484  
 Rico, M., 364(134), 451  
 Riddle, D. S.: 28(57), 34; 37(35), 53-55(35), 57-58(35), 61-62(35), 71; 460(3), 484  
 Rief, M., 36(20), 53-55(20), 57-58(20), 61-62(20), 71  
 Ringalda, M., 460(12), 484  
 Ripoll, D. R.: 142(146), 143(149), 184(146), 190; 195(9), 199(9), 220; 241(25), 244(25), 258(25,45), 262-263; 360(113-114), 451  
 Rivas, G., 364(135), 404(135), 452  
 Rivest, R. L., 79(19), 128  
 Roberts, V. A.: 173(225), 192; 288(33), 446  
 Roder, H., 36(19), 53-55(19), 57-58(19), 61-62(19), 71  
 Rodgers, J. R.: 87(47), 129; 224(6), 262  
 Rodriguez, G., 342(100), 450  
 Rogman, D., 414(233), 419(233), 457  
 Rokhsar, D. S.: 36-37(9), 49(9), 50(72), 53-55(9), 57-58(9), 61(9), 70, 73; 364(137), 452  
 Rokne, J., 273(24), 446  
 Romesburg, H. C., 239(24), 262  
 Rooman, M. J.: 226(14), 262; 460-461(1), 475(1), 484  
 Rose, G. D.: 36-37(11-12), 43-44(64), 49(11-12), 53-55(11-12), 57-58(11-12), 61(11-12), 70, 73; 360(116), 364(122-123), 410(201), 451, 455  
 Rosen, J. B., 360(118), 366(156), 451, 453  
 Rosenbluth, A. W., 41(62), 73  
 Rosenbluth, M. N., 41(62), 73  
 Rosenfield, R., 413(230), 456  
 Rossman, M. G., 422(240), 457  
 Rost, B.: 79(25), 128; 141(129-131), 189; 196(17), 220; 247-248(33-34), 263  
 Rotkiewicz, P.: 135(32), 140(120), 141(133), 142(133,140), 153(193), 154-155(133), 157(198-200), 161-162(199), 170(200), 174(193), 184(133), 187, 189, 191; 215(83), 222  
 Rotstein, S. H., 413(224-225), 456  
 Roux, B.: 404(166), 453; 461(41), 485  
 Rowland, M. B., 68(123), 76  
 Ruczinski, I.: 3(14), 7(14), 9-10(14), 16(14), 26(14), 28(57), 29(14), 32, 34; 37(35), 53-55(35), 57-58(35), 61-62(35), 71; 79(26), 128; 141(128), 180(243), 184(128), 189, 192; 200(44), 221; 246(31), 263; 360(108), 450; 461(63), 486  
 Rumbley, J., 36(13), 53-55(13), 57-58(13), 61(13), 70  
 Rumsey, S.: 83(42), 129; 288(38), 290-291(38), 340(38), 369(38), 393(38), 416(38), 447  
 Russell, R., 53(77), 73  
 Russell, R. B., 135(39), 137(39), 173(230), 184(39), 187, 192  
 Rychlewski, L.: 133(14), 149-151(181), 153(190), 161(181), 174(14), 180(241), 183(14), 186, 191-192; 196(10), 220  
 Sadanobu, J., 204(64), 221  
 Sahlman, L., 29(63), 34  
 Sahu, A., 347(102-103), 348(103), 450  
 Saibil, H. R., 68(123), 76  
 Salamov, A. A., 248(40), 263  
 Salemm, F. R., 213(81-82), 222  
 Sali, A.: 2(1-2,6,10), 3(2,6,10), 4(10), 6(7,10), 7(2,6,10), 8-9(10), 25(10), 26(1), 30(2,6,10), 31-32; 37(30,41), 39(41), 49(41), 53-55(30,41), 57-58(30,41), 61-62(30), 71-72; 134(23-24,27), 137(24), 139(97-98,106-107), 155(195), 161(203), 172-173(27), 185(23,27), 187-189, 191; 268(8), 445  
 Salt, D. W., 4(23), 32  
 Samudrala, R.: 79(13), 127; 142(142,145), 184(142), 190; 199(34-36), 204(35-36), 220; 246(29), 258(29), 262; 461(62), 465(72), 470(62), 475(62), 486  
 Sanchez, R., 134(23-24,27), 137(24), 172-173(37), 185(23,27), 187  
 Sander, C.: 14-15(69), 34; 78(5), 79(25), 87(44), 105(44), 120(44), 127-129; 141(129-131), 148(174), 161(205), 170(205), 189-191; 231(19,21), 247-248(33-34), 262-263; 293(56), 407(180), 448, 454; 460-462(17), 465(17), 472-474(17), 483(17), 485

- Santiago, J. V.: 28(57), 34; 37(35), 53-55(35), 57-58(35), 61-62(35), 71
- Sato, S., 34(65)
- Saunders, J. A., 195(9), 199(9), 220
- Saunders, M. A., 277(27-28), 299(28), 345(28), 435(28), 446
- Sayle, R., 50(126), 54(125), 60(126), 76
- Scapozza, L., 414(233), 419(233), 457
- Schaefer, M., 460(21), 481(77), 485-486
- Schaffer, A. A.: 125(59), 130; 151(182), 183(247), 191-192
- Scharf, M.: 78(5), 127; 148(174), 190; 293(56), 448
- Schauber, H., 407(176), 454
- Schellman, J. A., 10(46), 33
- Scheraga, H. A.: 79(12), 83(42), 93(12), 127, 129; 134(16), 139(108-110), 143(147,149), 144(108-110), 145(16,108-110,159-163), 186, 189-190; 195(9), 199(9,30), 200(46), 220-221; 225(9), 233(20), 239(23), 241(25), 244(25), 258(25,45), 262-263; 288(34-38), 290(38,46), 291(38), 292(52-53), 293(52,58,65), 294(67), 296(52,69-72), 299(52-53,74), 304(77), 314(84-85), 318(77), 321(87), 325(90), 340(38), 345(74), 360(113-115), 365(115,153-154), 366(155), 369(38), 393(38,115,153-154), 411(84), 413(219), 416(38), 417(52,238), 420(52,74) 435(74), 437(52-53), 446-449, 451-453, 456-457; 460(4), 461(46-47), 484-485
- Schiffer, C. A., 294(66), 448
- Schindler, T., 36(2), 58(2), 61(2), 70
- Schlegel, H. B., 392(159), 453
- Schlenkrich, M., 404(166), 453
- Schmid, F. X., 36(2), 58(2), 61(2), 70
- Schneider, R.: 78(5), 127; 79(25), 128; 247-248(34), 263
- Schoonman, M. J., 196(11), 220
- Schwartz, B., 440(250), 457
- Scott, R. A.: 196(15), 220; 461(48-49), 485
- Scott, W., 211(76), 221
- Seebach, D., 197(24), 220
- Seibel, G. L., 411(204-205), 413(205), 455
- Sela, M., 267(1), 331(1), 445
- Selbig, J., 136(46), 187
- Semenza, G., 68(124), 76
- Seno, F.: 196(12), 212(12), 220; 201(49), 221
- Serrano, L.: 28(58,60), 34; 364(132-133,135), 404(135), 451-452
- Sette, A., 440(250), 457
- Sfatos, C. D., 64(101), 74
- Shafraan, G., 79-80(32), 87(32), 93(32), 128
- Shakhnovich, E.: 2(2,6,9), 3(2,6,9,18), 4(9), 6(6,29), 7(2,6,9,35), 8(29,38-39), 29(9), 30(2,6,9,18), 31-33; 37(30), 39(52), 40(56), 53-55(30,52), 57-58(30,52), 61-62(30), 64(101), 71-72, 74; 78(8), 127; 139(97-105), 188-189; 268(8), 445
- Shalloway, D., 268(6), 445
- Sharp, K. A.: 292(51), 293(62), 443(252-253), 447-448, 457; 460(11), 461(11,27,30,38), 484-485
- Shastri, R., 36(19), 53-55(19), 57-58(19), 61-62(19), 71
- Shats, O., 201(53), 221
- Sheinerman, F. B., 364(136), 452
- Shen, J., 408(188), 454
- Shenkin, P. S.: 217(85), 222; 360(112), 450; 460(20), 461(20,34,39), 462(39), 470(20), 475(20), 478(20), 485
- Shepard, R., 365(147), 452
- Sheridan, R. P., 411(205,213-214), 413(205), 455-456
- Sherman, S., 201(53), 221
- Shimanouchi, T., 224(6), 262
- Shoemaker, K. R., 364(129), 451
- Shoichet, B. K., 411(211-212), 455
- Shortle, D., 360(109), 450
- Shtilerman, M., 67-68(120), 75
- Sibanda, B. L., 406(172), 453
- Siddiqui, A. S., 247(35), 263
- Siew, N., 133(12-13), 173-174(12), 186
- Sigler, P. B., 60(112), 64(100,105,107-108,112), 65(100,107-108), 67(100), 68(107), 74-75
- Sikorski, A., 139(85-88), 188
- Sillitoe, I.: 225(11), 258(11), 261(11), 262; 360(119), 451
- Silver, M. L., 406(170), 453
- Simmerling, C., 171(208), 191
- Simons, J., 365(146-147,149), 452
- Simons, K. T.: 3(12,14), 4(12), 7(12,14), 9-10(12,14), 14-15(12), 16(12,14), 24(12), 26(14), 29(14), 32; 37(37), 53-55(37), 57-58(37), 61-62(37), 71; 79(26), 128; 141(128), 184(128), 180(243), 189, 192; 200(44), 221; 246(30-31), 262-263; 360(108-109), 450; 461(63), 486
- Simonson, T., 461(32,40), 485
- Singh, J. P., 205(71), 221

- Singh, R. K., 135(41), 187  
 Singh, U. C.: 288(30), 446; 461(51), 480(51), 486  
 Sinigaglia, F., 440(249-250), 457  
 Sippl, M. J.: 3(78), 127; 79(14), 127; 136(47), 187; 201(47), 221; 224(7), 226-227(7), 262; 409(196), 455; 461(53-54), 486  
 Sitkoff, D., 460(11-13), 461(11), 484  
 Skolnick, J.: 39(54), 40(54), 49(54), 53-55(54), 57-58(54), 72; 78(4), 79(27,35,38), 93-94(38), 108(4), 127-129; 133(8,10-13,15), 136(45), 137(57), 139(72-83,85-88), 140(75-83,116-123,126), 141(122-123,136-138), 142(137), 144(116,151-153,156-157), 145(168), 146(156,168), 147(57,204), 148(45,57), 149(178), 151(178), 152(183), 153(191-192), 157(197), 158(202), 160(197), 167(197,202), 169(204), 171(137), 172(209), 173(8,10-12), 174(8,10-12,15,191), 175(8,10-11,15,57), 176(15), 183(15,244-245), 184(57,197), 185(8,10), 186-192; 196(18-19), 199(33), 200(42,45), 201(19,45), 203(18,61), 207(75), 209(18,61), 215(83), 220-222; 225(10), 246(27-28,32), 252(42), 262-263; 360(106-107), 450; 461(50), 486  
 Smith, J. C., 404(166), 453  
 Smith, L. J.: 2(1), 26(1), 31; 37(41), 39(41), 49(41), 53-55(41), 57-58(41), 72  
 Smith, P. E., 460(19), 485  
 Smith, S. B., 36(21), 53-55(21), 57-58(21), 61-62(21), 71  
 Smith, T. F.: 79(17), 108(17), 128; 133(9), 134(30), 136(30), 175(30), 177(30), 186-187  
 Smith-Brown, M. J., 202(54), 221  
 Smyte, M. L., 409(193), 455  
 Smythers, G. W., 461(57), 486  
 So, S.-S., 2-4(11), 6-8(11), 25(11), 30(11), 32  
 Socci, N. D.: 2-3(8), 6(8), 24(53), 30(8), 32-33; 37(31), 39-40(51), 42(51), 53-55(31,51), 57-58(31,51), 61-62(31), 71-72; 194(3), 220  
 Sollier, A., 205(69), 221  
 Solov'yev, V. V., 248(40), 263  
 Sonnhammer, E. L., 134(29), 187  
 Sosnick, T. R., 53(75), 73  
 Southgate, C. C. B., 293(60), 448  
 Spector, S., 34(67-68)  
 Srinivasan, R.: 43-44(64), 73; 360(116), 451  
 Stadler, P. F., 79(14-15), 127  
 Standley, D. M.: 199(31-32), 217(87), 220, 222; 224(1-2,4), 225-227(2), 229(16), 238(2), 241(2), 245(2), 246(4), 261(16), 262; 338(93), 360(93), 449; 460(7), 484  
 Stapley, B. J., 364(127), 451  
 States, D. J., 288(32), 294(32), 404(32), 446  
 Stefani, M., 28(59), 34  
 Stenberg, G., 65-67(118), 75  
 Stern, L., 406(171), 414-415(171), 417(171), 426(171), 432(171), 436(171), 453  
 Sternberg, M. J. E.: 79(11), 127; 134(18), 186; 248(37,41), 252(43), 263; 406(172), 453  
 Stewart, J. D.: 173(225), 192; 364(129), 451  
 Still, W. C., 461(37-39), 462(37,39), 463(37), 485  
 Stillinger, F. H., 313(82), 365(82), 449  
 Stote, R., 404(166), 453  
 Straatsma, T. P., 292(49), 447  
 Straub, J., 404(166), 453  
 Strominger, J. L., 406(170-171), 414-415(171), 417(171), 426(171), 432(171), 436(171), 453  
 Stroud, R. M., 294(66), 448  
 Stryer, L., 437(248), 457  
 Stura, E. A., 406(169), 453  
 Subbiah, S.: 407(178), 454; 462(65), 470(65), 486  
 Summers, N., 440(250), 457  
 Sun, S.: 139(63), 188; 360(110), 450  
 Sun, Z., 145(165), 190  
 Sutcliffe, M. J., 406(173), 453  
 Swaminathan, S., 288(32), 294(32), 404(32), 446  
 Swearingen, C., 440(250), 457  
 Swedendsen, R. H., 146(169), 190  
 Swendsen, R. H., 42(63), 73  
 Szabo, A.: 9(43), 33; 194(5), 220  
 Taddei, N., 28(59), 34  
 Takada, S., 9(44), 33  
 Takagi, T., 148(173), 190  
 Taketomi, H.: 39(49), 53-55(49), 57-58(49), 72; 139(69), 188  
 Tan, Y. T., 412(222), 456  
 Tanaka, T., 36-37(9), 49(9), 53-55(9), 57-58(9), 61(9), 70  
 Tang, C., 47(67), 49(67), 73  
 Tannor, D. J., 460(12), 484

- Tasumi, M., 224(6), 262  
 Taylor, H., 365(146,148), 452  
 Taylor, W. R.: 78(2), 79(41), 83(2), 127, 129;  
     135-136(42), 187; 206(73), 221; 248(41),  
     263  
 Teichmann, S. A., 152(186), 191  
 Tejero, R., 204(67), 221  
 Teller, A. H., 41(62), 73  
 Teller, E., 41(62), 73  
 Tempczyk, A., 461(37-38), 462-463(37), 485  
 Thiele, R.: 136(51), 187; 196(14), 211(14), 220  
 Thirumalai, D.: 7(32-33), 33; 36(10),  
     37(10,32,34,40,43-44), 38(45-47),  
     39(32,34,47,55), 40(32,55), 41(60),  
     42(32,60), 44(10,65), 46(46), 49(10),  
     52(10,32,34), 53(10,32,34,40,43-47,55,  
     73,78), 54-55(10,32,34,40,43-47,55),  
     56(45,89-90), 57-58(10,32,34,40,43-47,  
     55), 61(10,32,34), 62(32,34), 64(47,  
     103,110,114), 65(47,110), 66(47),  
     67(47,103), 68(114,122), 69(103), 70-76;  
     79-80(40), 129  
 Thomas, P. D.: 37(39), 39-41(39), 44(39),  
     53-55(39), 57-58(39), 72; 224(8), 226(8),  
     230(18), 262; 360(110), 450  
 Thompson, J. B.: 69(125), 76; 148(177), 190  
 Thompson, P. A.: 9(40), 33; 36(8,17),  
     53-55(8,17), 57-58(8,17), 61(8,17), 70;  
     364(142), 452  
 Thornton, J. M.: 78(2), 83(2), 127; 134(31),  
     135-136(42), 173(217,227,229), 187,  
     191-192; 211(77), 221; 406(172), 453;  
     460(2), 484  
 Thorsson, V., 203(63), 212(63), 221  
 Timms, D., 460(18), 485  
 Tirado-Rives, J.: 288(29), 408(29), 446; 462(64),  
     486  
 Tjandra, N., 202(59), 221  
 Tobi, D.: 40(57), 72; 79(30,32), 80(32), 87(32),  
     93(32), 99(30), 108(30), 128  
 Todd, M. J., 64(103), 67(103), 69(103), 75  
 Torda, A. E.: 200(41), 221; 460(18), 485  
 Treasurywala, A. M., 412(222), 456  
 Tress, M., 137(53), 184(53), 187  
 Tropsha, A.: 135(41), 187; 225(12), 262  
 Trosset, Jean-Yves, 412(219), 456  
 Truhlar, D., 460(14), 484  
 Tsai, C. J., 365(145), 370(145), 392(145), 452  
 Tuffery, P., 407(181), 454  
 Tui, H., 270(13), 445  
 Tylor, W., 155(194), 165(194), 191  
 Uchiyama, I., 148(173), 190  
 Ueda, Y.: 39(49), 53-55(49), 57-58(49), 72;  
     225(9), 262  
 Ullner, M., 139(65), 188  
 Underwood, D. J., 411(213-214), 456  
 Unger, R., 7(31), 33  
 Urban, R. G., 406(168,171), 414-415(171),  
     417(171), 426(171), 432(171), 436(171),  
     453  
 Vaidehi, N., 342(100), 450  
 Vaisman, I. I., 135(41), 187  
 Vajda, S., 409(196), 413(230), 414(232),  
     455-456  
 Vakser, I. A., 178-179(240), 192  
 Valencia, A., 196(17), 220  
 Van Gunsteren, W. F.: 197(24), 220; 211(76),  
     221; 288(41), 344(101), 364(144), 447,  
     450-452; 460(18), 485  
 Van Vlijmen, H.: 161(203), 191; 460(21), 485  
 Vasquez, M.: 321(87,89), 407(177), 417(238),  
     449, 454, 457; 461(46), 485  
 Vecchi, M. P., 269(10), 445  
 Venclovas, C., 134(26), 137(26), 187  
 Vendruscolo, M.: 26(56), 34; 79-80(33), 128;  
     196(16), 199(37), 220  
 Venkataraghavan, R., 411(205), 413(205), 455  
 Verkhivker, G., 409(194), 455  
 Verosub, E., 8(37), 30(37), 33  
 Viani, M. B., 69(125), 76  
 Vieth, M.: 140(124-126), 171(124-125), 189;  
     461(50), 486  
 Viitanen, P. V., 64(111), 75  
 Vila, J.: 292-293(52), 294(67), 299(52),  
     417(52,238), 420(42), 437(52), 447-448,  
     457; 461(46-47), 485  
 Vilafranca, J. E., 409(194), 455  
 Villegas, V., 28(60), 34  
 Vinckier, A., 68(124), 76  
 von Fryeberg, B., 293(55), 447  
 Vorobjev, Y. N., 460(23), 461(52), 485-486  
 Wallace, A. C., 173(227,229), 192  
 Waller, C. L., 409(193), 455  
 Wallqvist, A.: 139(64), 188; 409(192), 454;  
     461(57), 486  
 Walsky, J., 440(249), 457  
 Walther, D., 293(63), 448

- Wang, H., 411(212), 455  
Wang, J. S., 146(169), 190  
Wang, L., 225(12), 262  
Wang, Y.: 196(15), 220; 461(48-49), 485  
Warshel, A.: 138(58), 187; 461(28), 485  
Watanabe, M., 404(166), 453  
Waterman, M. S.: 79(17), 108(17), 128; 149(180), 190  
Wawak, R. J.: 79(12), 93(12), 127; 200(46), 221; 293(58), 366(155), 448, 453  
Weatherford, D. W., 213(81-82), 222  
Weaver, A. J., 64(106), 75  
Weaver, D. L., 10(48-49), 30(49), 33  
Weber, T. A., 313(82), 365(82), 449  
Weiner, P.: 288(30), 446; 461(51), 480(51), 486  
Weiner, S., 288(30-31), 446  
Weissman, J. S., 55(84-87), 57(84,87), 74  
Weitkus, S.: 3(78), 127; 136(47), 187; 461(53), 486  
Wellinga, H. W., 173(218-221), 191  
Weng, J.: 224(5), 262; 462(69), 486  
Wesson, L., 293(59), 448  
Westbrook, J. D., 462(68), 486  
Westerberg, K. M., 364(130-131), 366(130-131), 370(130-131), 371(131), 378(131), 451  
White, F. H. Jr., 267(1), 331(1), 445  
White, J. V., 133(9), 186  
White, O., 152(184), 191  
White, P. M., 28(59), 34  
Wiener, S. J., 461(51), 480(51), 486  
Wiley, D., 406(170-171), 414-415(171), 417(171,236), 425(236), 426(171,236), 432(171), 436(171), 453, 457  
Willett, P.: 202(58), 221; 413(221), 442(221), 456  
Williams, G. J. B.: 87(47), 129; 146(171), 169(171), 179(171), 190; 224(6), 262  
Williams, R. L.: 294(67), 417(238), 448, 457; 461(46-47), 485  
Williams, S., 36(15), 53-55(15), 57-58(15), 61(15), 70  
Williamson, M. P., 202(58), 221  
Wilmanns, M., 135(33), 136(48), 187  
Wilson, C., 138(63), 188  
Wilson, J. A., 406(169), 453  
Wingreen, N., 47(67), 49(67), 73  
Wiorkiewicz-Kuczera, J., 404(166), 453  
Wodak, S. J.: 226(14), 262; 410(197-199), 455; 460-461(1), 475(1), 484  
Wojcik, J., 212(80), 222  
Wold, S., 4(21-22), 32  
Wolf, Y. I., 183(247), 192  
Wolfenden, R., 293(60), 448  
Wolff, J., 288(33), 446  
Wolfson, H., 172-173(216), 191  
Wolynes, P. G.: 3(16-17), 9(16-17), 24(53), 30(16-17), 32-33; 37(29,31,33), 47(68), 53-55(29,31,33), 57-58(29,31,33), 61-62(29,31,33), 64(115), 71, 73, 75; 79(22,39), 80(39), 120-121(22), 128-129; 135(43), 187; 194(3), 220  
Wong, E., 34(67)  
Woodruff, W. H., 36(15), 53-55(15), 57-58(15), 61(15), 70  
Woodson, S. A., 53(78), 73  
Woodward, C., 57(93), 74  
Woulf, S., 440(250), 457  
Wright, M. H., 277(28), 299(28), 345(28), 364(125), 435(28), 446, 451  
Wright, P. E., 204(66), 221  
Wu, T. D., 132(7), 186  
Wu, W.-J., 34(65)  
Wunsch, C. D.: 79(16), 108(16), 128; 136(49), 149(49), 187  
Wüthrich, K.: 66-67(119), 75; 205(70), 221; 338(94), 342(94), 353(94), 356(94), 359(94), 450  
Wyman, J., 65(117), 75  
Wynn, E. W., 4(23), 32  
Xia, H., 142(142), 184(142), 190  
Xia, X., 145(165), 190  
Xia, Y.: 79(13), 127; 199(34), 220; 465(72), 486  
Xu, Z., 64-65(100,107), 67(100), 68(107), 74-75  
Xue, G. L., 411(210), 455  
Yang, A. S.: 134(20), 186; 292(51), 447; 461(30), 485  
Yaris, R., 139(73-75,77-78), 140(75,77-78), 188  
Yarmush, M., 462(68), 486  
Yi, Q., 212(79), 222  
Yi, T.-M., 135(36), 187  
Yifrach, O., 64(109), 65(109,116), 66(116), 75  
Yin, D., 404(166), 453  
Yoon, C. N.: 83(42), 129; 288(38), 290-291(38), 340(38), 369(38), 393(38), 416(38), 447  
York, E. J., 364(129), 451  
Young, W. S., 461(33), 485

- Yu, L., 133(9), 186  
 Yuan, F., 134(24), 137(24), 161(203), 187, 191  
 Yue, K.: 37(39), 39-41(39), 44(39), 53-55(39),  
     57-58(39), 72; 139(96), 188; 228(15), 262;  
     360(117), 451  
 Yuh, Y. H., 288(43), 447  
  
 Zagari, A.: 83(42), 129; 288(38), 290-291(38),  
     340(38), 369(38), 393(38), 416(38), 447  
 Zahn, R., 65-67(118), 75  
 Zaugg, F., 68(124), 76  
 Zemla, A., 134(26), 137(26), 187  
 Zhang, B.: 133(14), 149-151(181), 153(190),  
     161(181), 174(14), 183(14), 186, 191;  
     196(10), 220  
 Zhang, C., 201(51), 221  
  
 Zhang, H.: 196(15), 220; 461(48-49), 485  
 Zhang, J., 125(59), 130  
 Zhang, J. X., 58(94), 62(94), 74  
 Zhang, L.: 460(15), 484; 461(42), 462(42,70),  
     463(42), 485-486  
 Zhang, Z., 125(59), 130  
 Zheng, Q., 413(230), 456  
 Zhou, Y., 2(3), 3(3), 31  
 Zhu, H., 201(50), 221  
 Zhu, Z. Y., 173(233), 192  
 Zhuang, X., 53(77), 73  
 Ziegler, U., 68(124), 76  
 Zimmer, R.: 136(51), 187; 196(14), 211(14), 220  
 Zimmerman, S. S., 325(90), 449  
 Zvelebil, M. J., 248(41), 263  
 Zwanzig, R., 9(43), 25(55), 33-34