

- Biophys. J.* **86**, 2017 (2004).
11. K. S. Tai, S. D. Bond, H. R. Macmillan, N. A. Baker, M. J. Holst and J. A. McCammon, *Biophys. J.* **84**, 2234 (2003).
 12. H. Berry, *Biophys. J.* **83**, 1891 (2002).
 13. D. Genest, *Biopolymers* **28**, 1903 (1989).
 14. M. J. Saxton, *Biophys. J.* **61**, 119 (1992).
 15. J. A. McCammon, *Science* **238**, 486 (1987).
 16. S. H. Northrup, J. O. Boles and J. C. L. Reynolds, *Science* **241**, 67 (1988).
 17. R. C. Wade, M. E. Davis, B. A. Luty, J. D. Madura and J. A. Mccammon, *Biophys. J.* **64**, 9 (1993).
 18. P. Eastman and S. Doniach, *Proteins* **30**, 215 (1998).
 19. L. Yeomans-Reyna and M. Medina-Noyola, *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys.* **64**, p. 066114 (2001).
 20. R. J. Russell, L. F. Haire, D. J. Stevens, P. J. Collins, Y. P. Lin, G. M. Blackburn, A. J. Hay, S. J. Gamblin and J. J. Skehel, *Nature* **443**, 45 (2006).
 21. P. J. Collins, L. F. Haire, Y. P. Lin, J. F. Liu, R. J. Russell, P. A. Walker, J. J. Skehel, S. R. Martin, A. J. Hay and S. J. Gamblin, *Nature* **453**, 1258 (2008).
 22. I. Chern, J. Liu and W. Wang, *Methods Appl. Anal.* **10**, 309 (2003).
 23. H. X. Zhou, *J. Chem. Phys.* **92**, 3092 (1990).
 24. H. X. Zhou, S. T. Wlodek and J. A. McCammon, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **95**, 9280 (1998).
 25. H. X. Zhou, J. M. Briggs, S. Tara and J. A. McCammon, *Biopolymers* **45**, 355 (1998).
 26. M. F. Sanner, A. J. Olson and J. Spehner, *Proc. 11th ACM Symp. Comp. Geom.* **C6-C7** (1995).
 27. S. Tara, A. H. Elcock, J. M. Briggs, Z. Radić, P. Taylor and J. A. McCammon, *Biopolymers* **46**, 465 (1998).
 28. E. B. Krissinel and N. Agmon, *J. Comput. Chem.* **17**, 1085 (1996).
 29. Y. H. Cheng, J. K. Suen, Z. Radić, S. D. Bond, M. J. Holst and J. A. McCammon, *Biophys. Chem.* **127**, 129 (2007).