

## Support Information

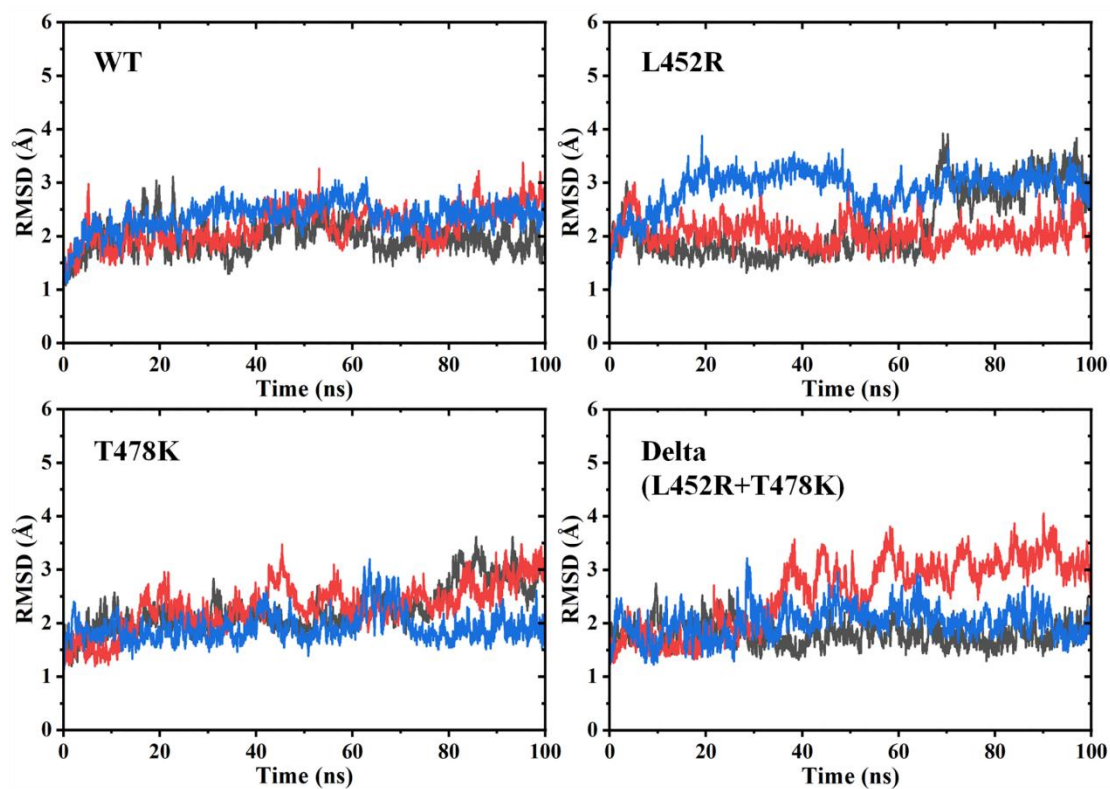
**Insights from computational analysis: how the SARS-CoV-2 Delta (B.1.617.2)  
variant hijacks ACE2 more effectively?**

*Danyang Xiong, Xiaoyu Zhao, Song Luo, Lili Duan\**

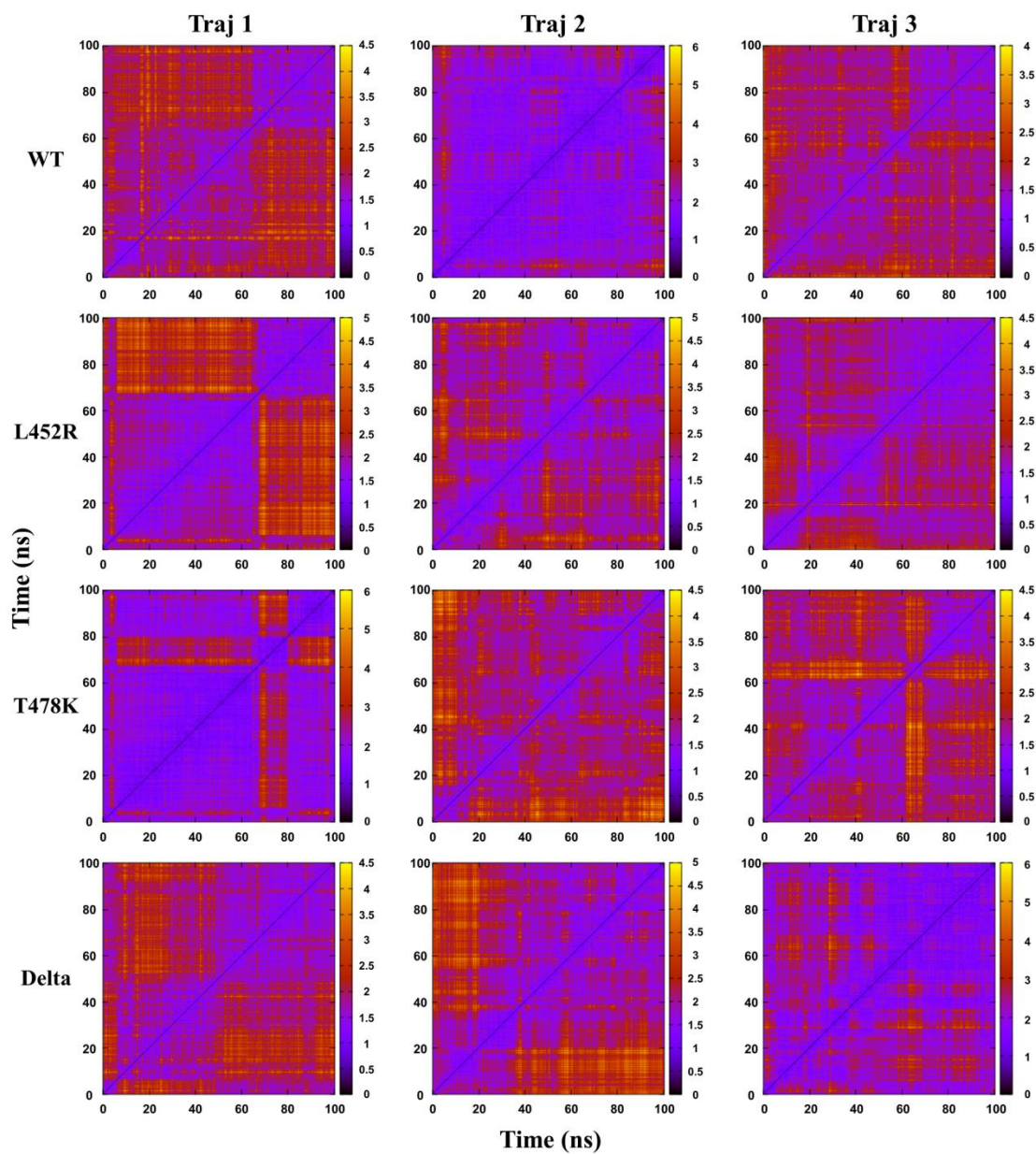
School of Physics and Electronics, Shandong Normal University, Jinan, 250014,

China

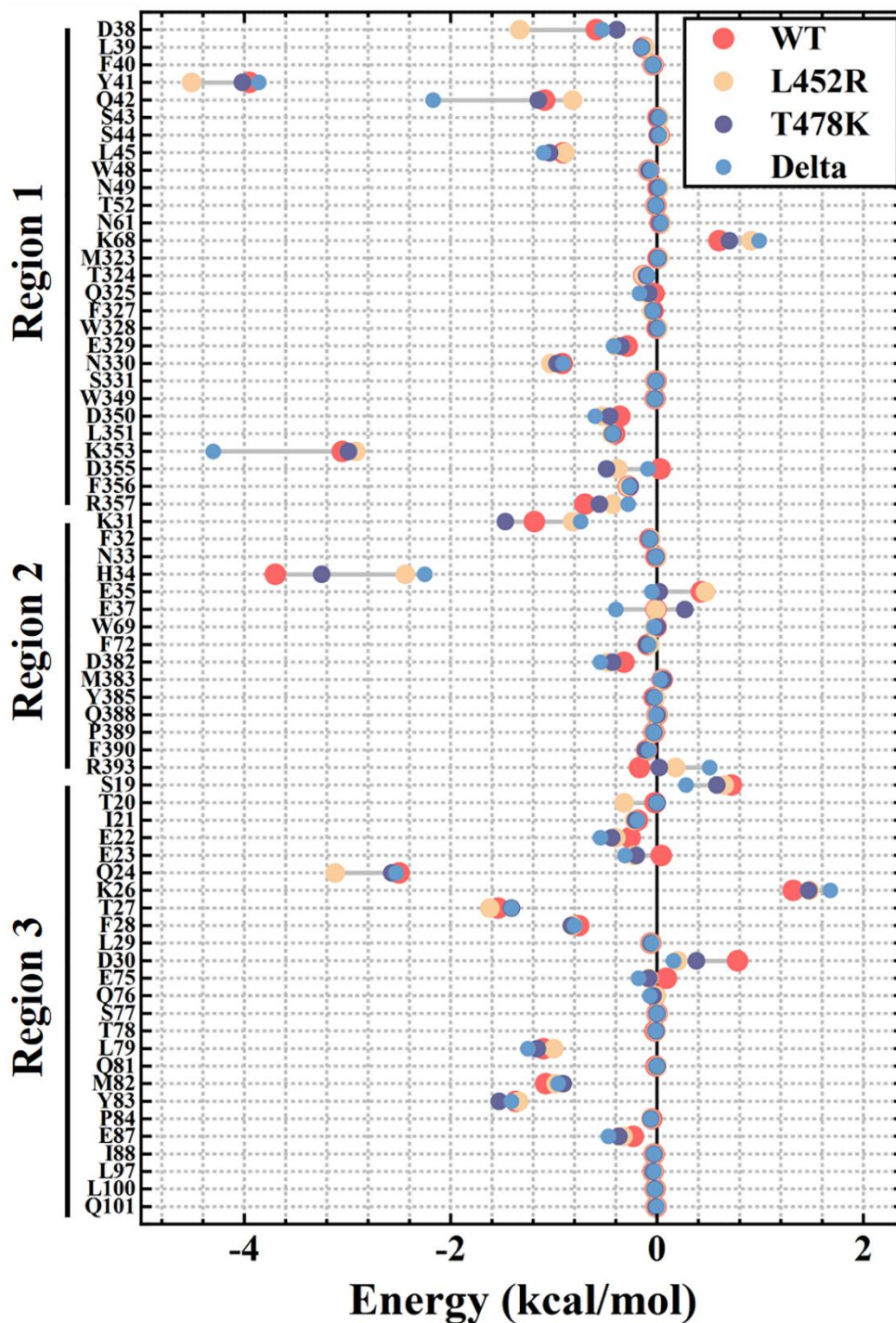
Corresponding author ([duanll@sdu.edu.cn](mailto:duanll@sdu.edu.cn))



**Figure S1.** The root mean square deviation (RMSD) of the backbone atoms in three independent trajectories of WT, two single mutants systems, and the Delta variant (L452R+T478K). Different trajectories are distinguished by different colors.

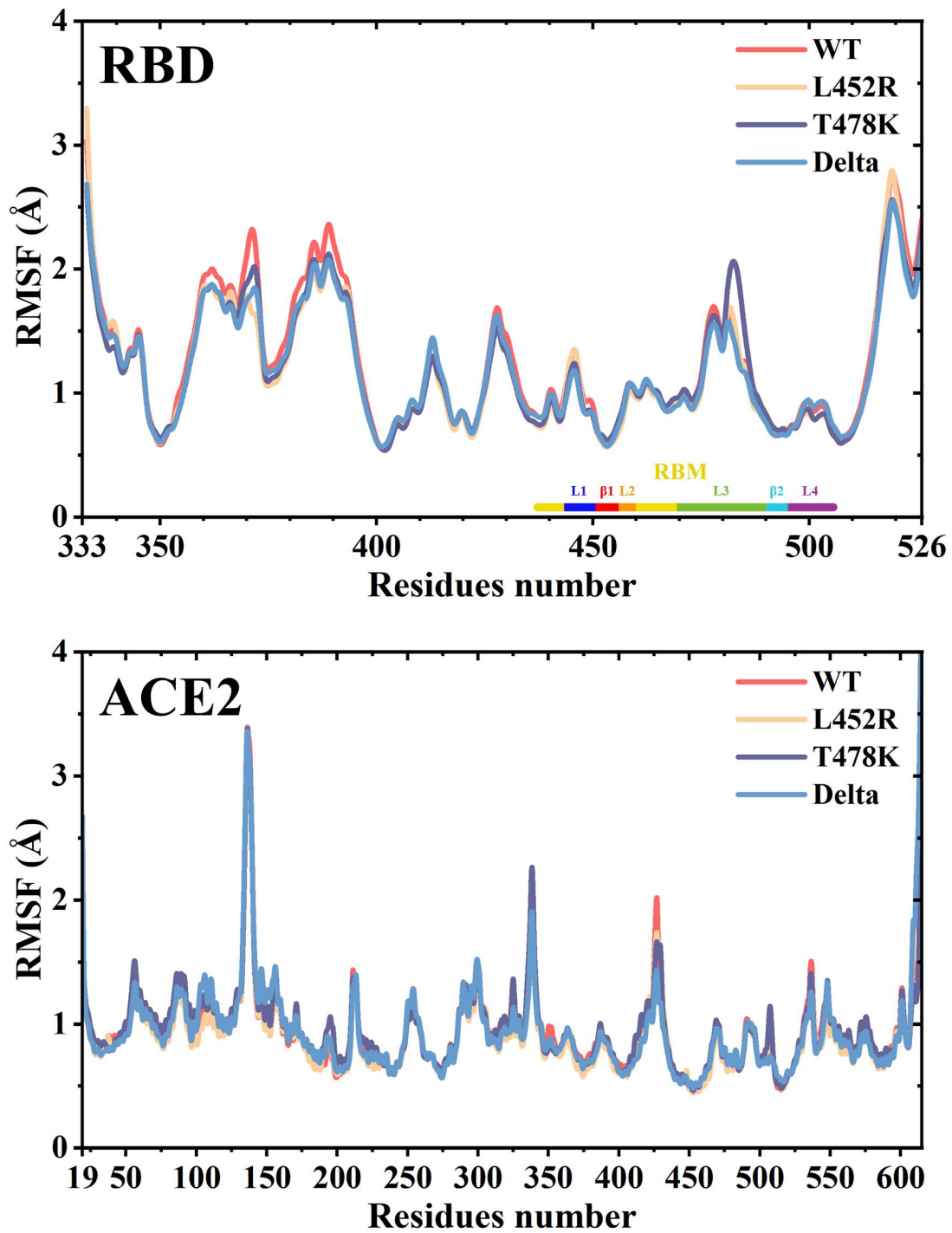


**Figure S2.** The 2D-RMSD of  $C_{\alpha}$  in three independent trajectories of WT, two single mutants systems, and the Delta variant (L452R+T478K).

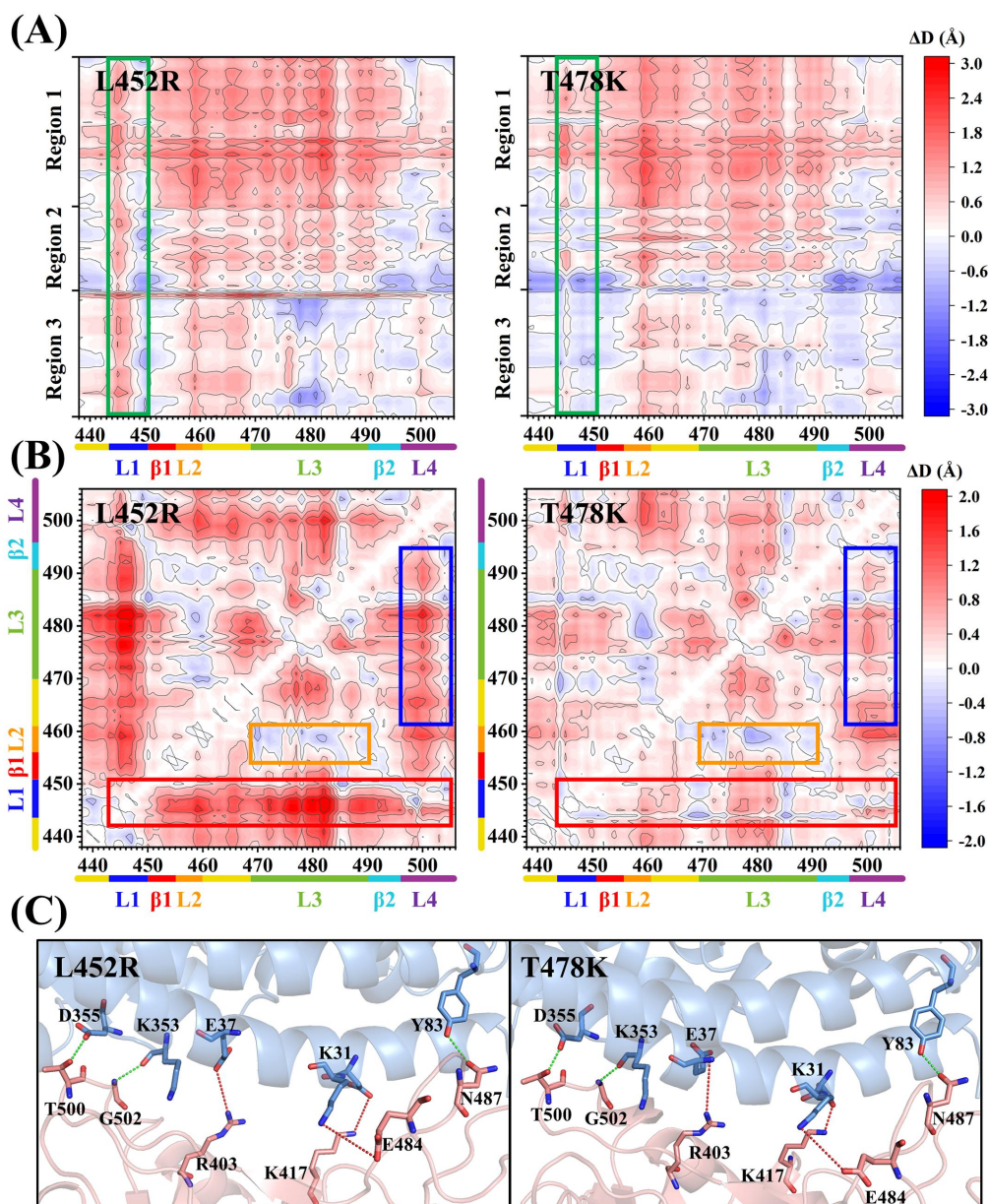


**Figure S3.** The scatter plots of the binding free energy contribution for each residue on ACE2 within 10 Å from the binding interface obtained by the ASIE method, where the WT is represented by red dots, L452R variant is orange-yellow dots, T478K variant is blue-violet dots, and Delta variant (L452R+T478K) is represented by light blue.

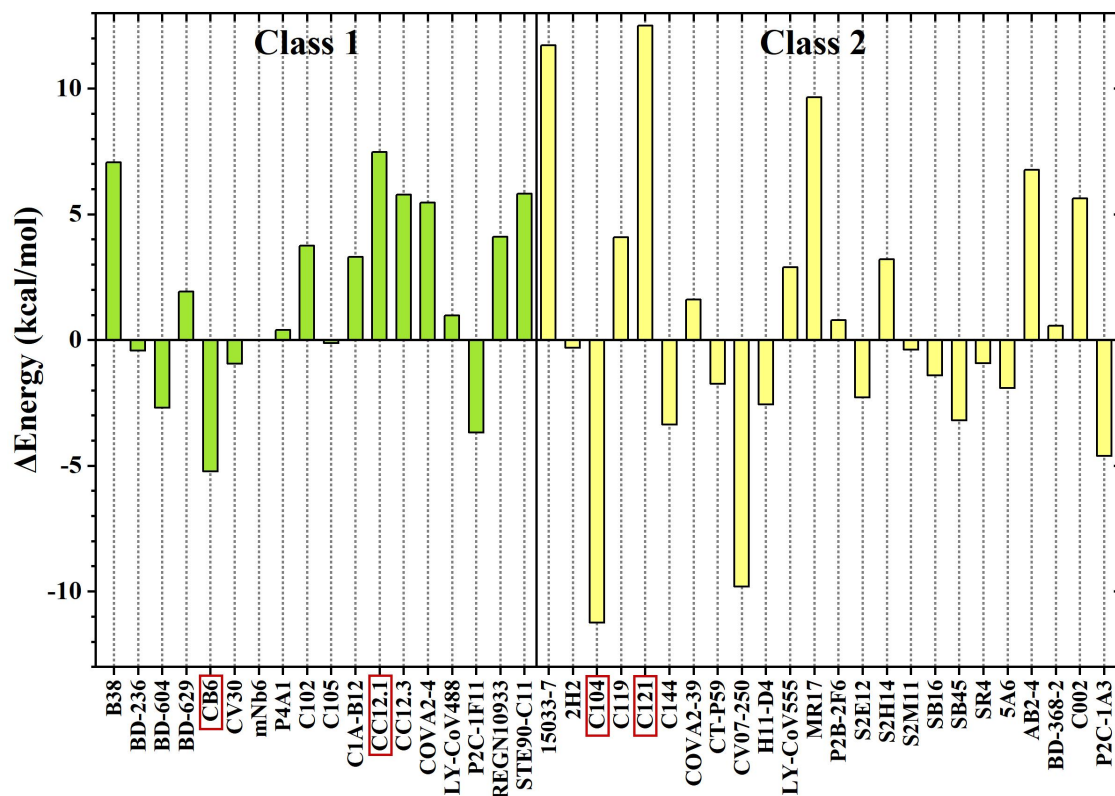




**Figure S4.** The root mean square fluctuation (RMSF) of the RBD and ACE2 of the four systems. The RBM area is specially marked by the color bar.



**Figure S5.** (A) Distance change between residues near RBD-ACE2 binding interface,  $\Delta D$  represents the difference between the average distance of the  $C_{\alpha}$  atoms for each residue during the simulation time and the original distance in their same initial structure. Positive values (colored in red) and negative values (colored in blue) represent the further and closer distances between residues, respectively. (B) The change of distance between residues in RBM. (C) The hydrogen bond network (occupancy greater than 70%) and salt bridge network formed at RBD-ACE2 binding interface, in which hydrogen bond is represented by the green dotted line and the salt bridge is represented by the red dotted line.



**Figure S6.** The sum of the energy contributions of each residue in the results of the ASIE is used to represent the total binding free energy, and the Class 1 and 2 antibodies are colored in green and yellow, respectively. In the two types of antibodies, the systems with the most energy increase and decrease are found, and they are marked with red rectangles.

**Table S1.** Energy terms of binding free energy for residues within 10 Å from the binding interface of RBD obtained by ASIE method (all values are in kcal/mol).

Systems	Residues	$\Delta\Delta E_{vdw}$	$\Delta\Delta E_{ele}$	$\Delta\Delta G_{gb}$	$\Delta\Delta G_{np}$	$\Delta\Delta H$	$-T\Delta\Delta S$	$\Delta\Delta G_{bind}$
WT	R403	-2.02(±0.06)	-55.47(±0.23)	52.09(±0.20)	-0.28(±0.01)	-5.67(±0.07)	1.33(±0.00)	-4.34(±0.07)
	D405	-0.24(±0.01)	52.03(±0.16)	-48.61(±0.15)	-0.01(±0.00)	3.18(±0.01)	0.62(±0.00)	3.79(±0.01)
	E406	-0.23(±0.01)	49.80(±0.15)	-46.59(±0.14)	-0.01(±0.00)	2.97(±0.01)	0.56(±0.00)	3.53(±0.01)
	R408	-0.18(±0.01)	-47.68(±0.18)	44.73(±0.17)	0.00(±0.00)	-3.13(±0.02)	0.67(±0.00)	-2.46(±0.02)
	Q409	-0.05(±0.00)	-1.10(±0.05)	1.08(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.10(±0.00)	0.03(±0.00)
	K417	-0.20(±0.13)	-56.67(±0.41)	52.52(±0.35)	-0.39(±0.01)	-4.74(±0.10)	3.46(±0.00)	-1.28(±0.10)
	I418	-0.06(±0.00)	-0.11(±0.01)	0.13(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.03(±0.00)
	D420	-0.03(±0.00)	40.82(±0.11)	-38.24(±0.10)	0.00(±0.00)	2.56(±0.01)	0.34(±0.00)	2.90(±0.01)
	Y421	-0.20(±0.00)	0.02(±0.08)	0.07(±0.08)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.29(±0.00)	0.19(±0.00)
	N422	-0.03(±0.00)	-0.37(±0.02)	0.34(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.02(±0.00)
	N437	-0.04(±0.00)	-0.41(±0.02)	0.40(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.02(±0.00)
	N439	-0.10(±0.00)	-0.18(±0.03)	0.19(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.08(±0.00)	-0.01(±0.00)
	N440	-0.02(±0.00)	0.44(±0.10)	-0.40(±0.09)	0.00(±0.00)	0.02(±0.00)	0.31(±0.00)	0.33(±0.00)
	D442	-0.01(±0.00)	41.09(±0.07)	-38.52(±0.06)	0.00(±0.00)	2.56(±0.00)	0.15(±0.00)	2.71(±0.00)
	S443	-0.03(±0.00)	0.26(±0.02)	-0.26(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.04(±0.00)	0.02(±0.00)
	K444	-0.05(±0.00)	-43.45(±0.13)	40.76(±0.12)	0.00(±0.00)	-2.74(±0.01)	0.54(±0.00)	-2.19(±0.01)
	V445	-0.14(±0.01)	-0.07(±0.01)	0.17(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.05(±0.00)	0.01(±0.00)
	N448	-0.03(±0.00)	-0.30(±0.02)	0.29(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.01(±0.00)
	Y449	-1.84(±0.15)	-2.77(±0.17)	2.64(±0.13)	-0.49(±0.01)	-2.46(±0.12)	1.31(±0.00)	-1.15(±0.12)
	Y451	-0.04(±0.00)	-0.32(±0.02)	0.32(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.02(±0.00)
	L452	-0.07(±0.00)	0.18(±0.02)	-0.14(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.05(±0.00)	0.01(±0.00)
	Y453	-1.52(±0.10)	-1.67(±0.10)	1.85(±0.07)	-0.27(±0.01)	-1.61(±0.08)	1.03(±0.00)	-0.58(±0.08)
	R454	-0.05(±0.00)	-37.92(±0.07)	35.56(±0.06)	0.00(±0.00)	-2.41(±0.00)	0.17(±0.00)	-2.24(±0.00)
	L455	-3.55(±0.05)	-0.62(±0.03)	1.19(±0.04)	-0.42(±0.00)	-3.39(±0.05)	0.33(±0.00)	-3.06(±0.05)
	F456	-4.41(±0.08)	-1.09(±0.06)	2.21(±0.06)	-0.58(±0.01)	-3.86(±0.09)	1.56(±0.00)	-2.31(±0.09)
	R457	-0.03(±0.00)	-35.47(±0.06)	33.26(±0.06)	0.00(±0.00)	-2.24(±0.00)	0.14(±0.00)	-2.10(±0.00)
	K458	-0.12(±0.01)	-34.23(±0.21)	32.15(±0.20)	-0.01(±0.00)	-2.21(±0.02)	0.79(±0.00)	-1.42(±0.02)
	I472	-0.05(±0.00)	0.02(±0.01)	-0.01(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.04(±0.00)
	Y473	-1.18(±0.03)	-1.03(±0.07)	1.31(±0.07)	-0.15(±0.01)	-1.06(±0.03)	0.56(±0.00)	-0.50(±0.03)
	Q474	-0.12(±0.00)	-0.11(±0.04)	0.14(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.09(±0.00)	0.01(±0.00)
	S477	-0.10(±0.02)	-0.13(±0.12)	0.11(±0.09)	-0.03(±0.01)	-0.16(±0.04)	0.35(±0.00)	0.19(±0.04)
	T478	-0.07(±0.01)	0.14(±0.04)	-0.08(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.01)	0.07(±0.00)	0.06(±0.01)
	C480	-0.03(±0.00)	0.51(±0.02)	-0.49(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.01(±0.00)
	V483	-0.02(±0.00)	-0.02(±0.01)	0.03(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)
	E484	-0.24(±0.02)	41.65(±0.16)	-38.92(±0.15)	-0.03(±0.01)	2.45(±0.02)	0.97(±0.00)	3.43(±0.02)
	F486	-5.68(±0.14)	-1.47(±0.08)	3.19(±0.09)	-0.86(±0.02)	-4.82(±0.14)	1.72(±0.00)	-3.10(±0.14)
	N487	-1.93(±0.11)	-1.51(±0.09)	1.29(±0.05)	-0.40(±0.01)	-2.55(±0.09)	1.74(±0.00)	-0.81(±0.09)
	C488	-0.05(±0.00)	-0.93(±0.02)	0.93(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
	Y489	-6.21(±0.07)	0.55(±0.03)	0.30(±0.03)	-0.84(±0.01)	-6.19(±0.07)	0.67(±0.00)	-5.52(±0.07)
	F490	-0.13(±0.00)	0.29(±0.01)	-0.20(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	-0.01(±0.00)	-0.04(±0.00)
P491	-0.04(±0.00)	0.43(±0.00)	-0.42(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.02(±0.00)	
L492	-0.04(±0.00)	0.38(±0.01)	-0.37(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.05(±0.00)	0.02(±0.00)	
Q493	-2.79(±0.18)	-9.78(±0.19)	7.37(±0.13)	-0.81(±0.01)	-6.01(±0.14)	3.16(±0.00)	-2.85(±0.14)	
S494	-0.12(±0.01)	-0.19(±0.11)	0.28(±0.10)	-0.01(±0.00)	-0.03(±0.01)	0.37(±0.00)	0.33(±0.01)	



Y495	-0.50(±0.02)	-0.48(±0.01)	0.56(±0.01)	-0.01(±0.00)	-0.43(±0.02)	0.05(±0.00)	-0.38(±0.02)
F497	-0.28(±0.00)	0.24(±0.02)	-0.36(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.40(±0.01)	0.08(±0.00)	-0.31(±0.01)
Q498	-3.16(±0.13)	-3.85(±0.15)	2.27(±0.09)	-0.46(±0.01)	-5.19(±0.10)	1.64(±0.00)	-3.56(±0.10)
P499	-0.19(±0.00)	0.18(±0.01)	-0.18(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.21(±0.00)	0.07(±0.00)	-0.13(±0.00)
T500	-0.34(±0.14)	-3.61(±0.08)	3.34(±0.04)	-0.28(±0.00)	-0.90(±0.11)	1.69(±0.00)	0.79(±0.11)
N501	-3.10(±0.07)	-3.13(±0.09)	2.45(±0.06)	-0.22(±0.01)	-3.99(±0.06)	0.85(±0.00)	-3.14(±0.06)
V503	-0.39(±0.03)	0.23(±0.01)	-0.06(±0.02)	-0.04(±0.01)	-0.25(±0.03)	0.10(±0.00)	-0.16(±0.03)
Y505	-6.74(±0.14)	-3.19(±0.21)	3.35(±0.15)	-0.97(±0.01)	-7.55(±0.11)	1.92(±0.00)	-5.62(±0.11)
Q506	-0.32(±0.01)	-2.21(±0.02)	2.18(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.36(±0.01)	0.05(±0.00)	-0.31(±0.01)
P507	-0.05(±0.00)	0.07(±0.01)	-0.10(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)
Y508	-0.08(±0.00)	0.20(±0.04)	-0.18(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.08(±0.00)	0.02(±0.00)
R403	-1.45(±0.05)	-55.78(±0.24)	52.42(±0.21)	-0.17(±0.01)	-4.98(±0.06)	1.33(±0.00)	-3.66(±0.07)
D405	-0.20(±0.01)	52.20(±0.14)	-48.79(±0.13)	-0.01(±0.00)	3.20(±0.01)	0.60(±0.00)	3.81(±0.01)
E406	-0.16(±0.00)	49.33(±0.13)	-46.17(±0.13)	0.00(±0.00)	2.99(±0.01)	0.50(±0.00)	3.49(±0.01)
R408	-0.18(±0.01)	-48.21(±0.14)	45.23(±0.13)	0.00(±0.00)	-3.17(±0.01)	0.57(±0.00)	-2.60(±0.01)
Q409	-0.05(±0.00)	-1.00(±0.06)	0.99(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.12(±0.00)	0.06(±0.00)
K417	-0.48(±0.12)	-55.57(±0.39)	51.53(±0.32)	-0.35(±0.01)	-4.87(±0.10)	3.05(±0.00)	-1.81(±0.10)
I418	-0.05(±0.00)	-0.14(±0.01)	0.16(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.02(±0.00)
D420	-0.02(±0.00)	40.62(±0.11)	-38.05(±0.10)	0.00(±0.00)	2.54(±0.01)	0.33(±0.00)	2.87(±0.01)
Y421	-0.19(±0.00)	0.16(±0.07)	-0.07(±0.07)	0.00(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.26(±0.00)	0.17(±0.00)
N422	-0.03(±0.00)	-0.32(±0.02)	0.31(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.01(±0.00)
N437	-0.05(±0.00)	-0.35(±0.02)	0.35(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.05(±0.00)	-0.01(±0.00)
N439	-0.11(±0.00)	-0.34(±0.04)	0.36(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.10(±0.00)	0.01(±0.00)
N440	-0.02(±0.00)	0.22(±0.10)	-0.18(±0.10)	0.00(±0.00)	0.02(±0.00)	0.34(±0.00)	0.35(±0.00)
D442	-0.01(±0.00)	41.89(±0.06)	-39.27(±0.06)	0.00(±0.00)	2.61(±0.00)	0.15(±0.00)	2.76(±0.00)
S443	-0.03(±0.00)	0.26(±0.03)	-0.25(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.04(±0.00)	0.02(±0.00)
K444	-0.05(±0.00)	-44.31(±0.14)	41.57(±0.14)	0.00(±0.00)	-2.79(±0.01)	0.56(±0.00)	-2.23(±0.01)
V445	-0.13(±0.01)	-0.03(±0.01)	0.12(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.07(±0.00)	0.03(±0.00)
N448	-0.03(±0.00)	-0.27(±0.02)	0.26(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.04(±0.00)	0.00(±0.00)
Y449	-1.96(±0.13)	-1.84(±0.23)	1.81(±0.19)	-0.39(±0.01)	-2.38(±0.10)	1.03(±0.00)	-1.35(±0.10)
Y451	-0.03(±0.00)	-0.39(±0.01)	0.38(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.04(±0.00)
R452	-0.08(±0.00)	-41.55(±0.14)	38.98(±0.13)	0.00(±0.00)	-2.65(±0.01)	0.48(±0.00)	-2.16(±0.01)
Y453	-1.40(±0.08)	-1.19(±0.10)	1.52(±0.07)	-0.25(±0.01)	-1.32(±0.06)	0.73(±0.00)	-0.59(±0.06)
R454	-0.05(±0.00)	-38.23(±0.07)	35.85(±0.06)	0.00(±0.00)	-2.43(±0.00)	0.17(±0.00)	-2.26(±0.00)
L455	-3.76(±0.06)	-0.72(±0.03)	1.39(±0.04)	-0.46(±0.01)	-3.55(±0.06)	0.39(±0.00)	-3.16(±0.06)
F456	-4.44(±0.08)	-1.09(±0.07)	2.24(±0.07)	-0.58(±0.01)	-3.87(±0.08)	1.51(±0.00)	-2.36(±0.08)
R457	-0.02(±0.00)	-35.73(±0.06)	33.50(±0.06)	0.00(±0.00)	-2.25(±0.00)	0.13(±0.00)	-2.12(±0.00)
K458	-0.08(±0.01)	-34.66(±0.17)	32.54(±0.16)	0.00(±0.00)	-2.20(±0.02)	0.63(±0.00)	-1.58(±0.02)
I472	-0.05(±0.00)	0.04(±0.01)	-0.03(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
Y473	-1.06(±0.03)	-0.86(±0.07)	1.10(±0.07)	-0.13(±0.00)	-0.95(±0.03)	0.46(±0.00)	-0.49(±0.03)
Q474	-0.13(±0.00)	-0.32(±0.04)	0.34(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.07(±0.00)	-0.03(±0.00)
S477	-0.15(±0.05)	-0.57(±0.12)	0.32(±0.09)	-0.08(±0.01)	-0.48(±0.06)	0.49(±0.00)	0.01(±0.06)
T478	0.08(±0.03)	-0.39(±0.07)	0.28(±0.05)	-0.01(±0.00)	-0.02(±0.02)	0.32(±0.00)	0.29(±0.02)
C480	-0.04(±0.00)	0.74(±0.02)	-0.73(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.01(±0.00)
V483	-0.02(±0.00)	0.00(±0.01)	0.01(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)
E484	-0.25(±0.02)	42.58(±0.19)	-39.79(±0.17)	-0.04(±0.01)	2.50(±0.03)	1.10(±0.00)	3.61(±0.03)
F486	-6.29(±0.12)	-1.43(±0.08)	3.31(±0.07)	-0.93(±0.02)	-5.34(±0.12)	1.64(±0.00)	-3.70(±0.12)
N487	-1.62(±0.13)	-1.79(±0.08)	1.42(±0.04)	-0.36(±0.00)	-2.35(±0.11)	1.79(±0.00)	-0.56(±0.11)
C488	-0.05(±0.00)	-0.76(±0.02)	0.76(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)

L452R

Y489	-5.99(±0.08)	0.50(±0.03)	0.31(±0.03)	-0.84(±0.01)	-6.01(±0.08)	0.77(±0.00)	-5.25(±0.08)
F490	-0.12(±0.00)	0.28(±0.01)	-0.19(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	-0.01(±0.00)	-0.05(±0.00)
P491	-0.04(±0.00)	0.44(±0.00)	-0.43(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.01(±0.00)
L492	-0.04(±0.00)	0.41(±0.01)	-0.40(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.06(±0.00)	0.03(±0.00)
Q493	-2.37(±0.18)	-10.34(±0.22)	8.02(±0.15)	-0.82(±0.01)	-5.51(±0.14)	3.19(±0.00)	-2.32(±0.14)
S494	-0.07(±0.01)	-0.45(±0.09)	0.51(±0.09)	-0.01(±0.00)	-0.01(±0.01)	0.32(±0.00)	0.31(±0.01)
Y495	-0.36(±0.02)	-0.72(±0.02)	0.79(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.29(±0.01)	0.06(±0.00)	-0.24(±0.01)
F497	-0.28(±0.01)	0.38(±0.02)	-0.59(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.49(±0.02)	0.10(±0.00)	-0.39(±0.02)
Q498	-2.67(±0.16)	-5.71(±0.14)	2.76(±0.07)	-0.46(±0.01)	-6.07(±0.13)	2.28(±0.00)	-3.80(±0.13)
P499	-0.22(±0.00)	0.21(±0.01)	-0.23(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.24(±0.01)	0.09(±0.00)	-0.15(±0.01)
T500	-0.54(±0.14)	-3.67(±0.08)	3.40(±0.04)	-0.29(±0.00)	-1.11(±0.11)	1.51(±0.00)	0.40(±0.11)
N501	-3.27(±0.07)	-5.89(±0.11)	4.50(±0.06)	-0.19(±0.01)	-4.85(±0.08)	1.23(±0.00)	-3.61(±0.08)
V503	-0.56(±0.04)	0.23(±0.01)	0.00(±0.02)	-0.06(±0.01)	-0.38(±0.03)	0.14(±0.00)	-0.24(±0.03)
Y505	-6.56(±0.15)	-3.41(±0.23)	3.54(±0.17)	-0.94(±0.01)	-7.37(±0.13)	2.08(±0.00)	-5.29(±0.13)
Q506	-0.39(±0.02)	-2.32(±0.04)	2.28(±0.03)	-0.01(±0.00)	-0.44(±0.02)	0.08(±0.00)	-0.36(±0.02)
P507	-0.05(±0.00)	0.07(±0.00)	-0.11(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.09(±0.00)
Y508	-0.09(±0.00)	0.29(±0.04)	-0.26(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.07(±0.00)	0.00(±0.00)
R403	-1.41(±0.04)	-55.48(±0.19)	52.03(±0.17)	-0.13(±0.01)	-5.00(±0.06)	1.08(±0.00)	-3.92(±0.06)
D405	-0.24(±0.01)	52.17(±0.15)	-48.75(±0.14)	-0.01(±0.00)	3.18(±0.01)	0.60(±0.00)	3.77(±0.01)
E406	-0.17(±0.00)	49.67(±0.14)	-46.48(±0.13)	0.00(±0.00)	3.01(±0.01)	0.53(±0.00)	3.54(±0.01)
R408	-0.19(±0.01)	-47.87(±0.14)	44.91(±0.13)	0.00(±0.00)	-3.15(±0.02)	0.63(±0.00)	-2.52(±0.02)
Q409	-0.05(±0.00)	-1.28(±0.04)	1.26(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.07(±0.00)	0.09(±0.00)	0.02(±0.00)
K417	-0.39(±0.09)	-53.33(±0.42)	49.80(±0.36)	-0.24(±0.01)	-4.16(±0.08)	2.53(±0.00)	-1.63(±0.08)
I418	-0.05(±0.00)	-0.18(±0.01)	0.20(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.02(±0.00)
D420	-0.02(±0.00)	39.90(±0.11)	-37.38(±0.10)	0.00(±0.00)	2.50(±0.01)	0.32(±0.00)	2.82(±0.01)
Y421	-0.17(±0.00)	0.14(±0.07)	-0.04(±0.07)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.24(±0.00)	0.17(±0.00)
N422	-0.03(±0.00)	-0.23(±0.02)	0.22(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.01(±0.00)
N437	-0.05(±0.00)	-0.35(±0.02)	0.34(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.04(±0.00)	-0.02(±0.00)
N439	-0.11(±0.00)	-0.41(±0.04)	0.42(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.11(±0.00)	0.09(±0.00)	-0.02(±0.00)
N440	-0.02(±0.00)	0.20(±0.08)	-0.17(±0.08)	0.00(±0.00)	0.01(±0.00)	0.26(±0.00)	0.27(±0.00)
D442	-0.01(±0.00)	41.45(±0.07)	-38.86(±0.06)	0.00(±0.00)	2.58(±0.00)	0.15(±0.00)	2.73(±0.00)
S443	-0.02(±0.00)	0.03(±0.03)	-0.03(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.06(±0.00)	0.03(±0.00)
K444	-0.05(±0.00)	-43.39(±0.14)	40.71(±0.13)	0.00(±0.00)	-2.73(±0.01)	0.49(±0.00)	-2.24(±0.01)
V445	-0.14(±0.01)	-0.05(±0.01)	0.13(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.01)	0.06(±0.00)	0.00(±0.01)
N448	-0.03(±0.00)	-0.32(±0.02)	0.31(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.01(±0.00)
Y449	-0.90(±0.12)	-3.77(±0.27)	3.46(±0.22)	-0.38(±0.02)	-1.59(±0.11)	1.51(±0.00)	-0.08(±0.11)
Y451	-0.03(±0.00)	-0.40(±0.01)	0.39(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
L452	-0.07(±0.00)	0.14(±0.02)	-0.10(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.05(±0.00)	0.01(±0.00)
Y453	-1.49(±0.08)	-1.41(±0.07)	1.68(±0.05)	-0.22(±0.00)	-1.44(±0.07)	0.78(±0.00)	-0.66(±0.07)
R454	-0.05(±0.00)	-37.61(±0.07)	35.27(±0.07)	0.00(±0.00)	-2.39(±0.00)	0.17(±0.00)	-2.22(±0.00)
L455	-3.49(±0.06)	-0.69(±0.03)	1.31(±0.04)	-0.42(±0.01)	-3.29(±0.05)	0.27(±0.00)	-3.02(±0.06)
F456	-4.17(±0.09)	-0.98(±0.06)	2.11(±0.06)	-0.56(±0.01)	-3.60(±0.08)	1.51(±0.00)	-2.08(±0.08)
R457	-0.02(±0.00)	-35.00(±0.06)	32.82(±0.06)	0.00(±0.00)	-2.21(±0.00)	0.13(±0.00)	-2.08(±0.00)
K458	-0.10(±0.01)	-33.99(±0.19)	31.92(±0.17)	0.00(±0.00)	-2.17(±0.02)	0.70(±0.00)	-1.47(±0.02)
I472	-0.05(±0.00)	0.03(±0.01)	-0.03(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
Y473	-1.09(±0.03)	-0.83(±0.08)	1.09(±0.08)	-0.14(±0.01)	-0.97(±0.03)	0.52(±0.00)	-0.45(±0.03)
Q474	-0.14(±0.01)	-0.04(±0.04)	0.08(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.01)	0.09(±0.00)	-0.01(±0.01)
S477	-0.07(±0.04)	-0.52(±0.14)	0.38(±0.10)	-0.05(±0.01)	-0.26(±0.04)	0.60(±0.00)	0.33(±0.04)
K478	-0.10(±0.01)	-37.41(±0.18)	35.13(±0.17)	0.00(±0.00)	-2.38(±0.01)	1.34(±0.00)	-1.04(±0.01)

T478K

	<b>C480</b>	-0.03(±0.00)	0.54(±0.02)	-0.52(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)
	<b>V483</b>	-0.02(±0.00)	-0.01(±0.01)	0.02(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)
	<b>E484</b>	-0.26(±0.02)	41.57(±0.16)	-38.85(±0.14)	-0.04(±0.01)	2.42(±0.03)	1.04(±0.00)	3.46(±0.03)
	<b>F486</b>	-6.55(±0.12)	-1.54(±0.07)	3.45(±0.07)	-0.94(±0.01)	-5.58(±0.12)	1.57(±0.00)	-4.01(±0.12)
	<b>N487</b>	-1.64(±0.14)	-1.72(±0.09)	1.35(±0.05)	-0.36(±0.00)	-2.37(±0.11)	1.83(±0.00)	-0.54(±0.11)
	<b>C488</b>	-0.05(±0.00)	-0.89(±0.02)	0.89(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
	<b>Y489</b>	-6.10(±0.07)	0.43(±0.04)	0.40(±0.03)	-0.85(±0.01)	-6.12(±0.07)	0.79(±0.00)	-5.32(±0.07)
	<b>F490</b>	-0.14(±0.00)	0.25(±0.01)	-0.15(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
	<b>P491</b>	-0.04(±0.00)	0.42(±0.01)	-0.40(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.02(±0.00)
	<b>L492</b>	-0.04(±0.00)	0.41(±0.01)	-0.40(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.05(±0.00)	0.02(±0.00)
	<b>Q493</b>	-2.83(±0.17)	-7.26(±0.33)	5.58(±0.25)	-0.78(±0.01)	-5.29(±0.13)	2.68(±0.00)	-2.61(±0.13)
	<b>S494</b>	-0.09(±0.01)	-0.04(±0.09)	0.14(±0.09)	-0.01(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.26(±0.00)	0.25(±0.00)
	<b>Y495</b>	-0.47(±0.02)	-0.71(±0.02)	0.78(±0.02)	-0.01(±0.00)	-0.41(±0.02)	0.06(±0.00)	-0.36(±0.02)
	<b>F497</b>	-0.25(±0.00)	0.12(±0.02)	-0.24(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.38(±0.01)	0.06(±0.00)	-0.32(±0.01)
	<b>Q498</b>	-2.78(±0.16)	-5.41(±0.15)	2.85(±0.08)	-0.52(±0.01)	-5.86(±0.16)	2.18(±0.00)	-3.68(±0.16)
	<b>P499</b>	-0.21(±0.00)	0.21(±0.01)	-0.22(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.23(±0.01)	0.09(±0.00)	-0.13(±0.01)
	<b>T500</b>	-0.53(±0.14)	-3.58(±0.08)	3.31(±0.04)	-0.29(±0.00)	-1.09(±0.11)	1.46(±0.00)	0.37(±0.11)
	<b>N501</b>	-3.41(±0.06)	-4.14(±0.15)	3.34(±0.11)	-0.22(±0.01)	-4.43(±0.07)	1.07(±0.00)	-3.36(±0.07)
	<b>V503</b>	-0.50(±0.03)	0.23(±0.01)	0.00(±0.02)	-0.05(±0.01)	-0.32(±0.03)	0.13(±0.00)	-0.19(±0.03)
	<b>Y505</b>	-6.48(±0.15)	-4.03(±0.21)	3.99(±0.15)	-0.96(±0.01)	-7.49(±0.12)	2.21(±0.00)	-5.27(±0.12)
	<b>Q506</b>	-0.37(±0.01)	-2.21(±0.03)	2.19(±0.03)	-0.01(±0.00)	-0.40(±0.01)	0.06(±0.00)	-0.34(±0.01)
	<b>P507</b>	-0.05(±0.00)	0.06(±0.01)	-0.10(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)
	<b>Y508</b>	-0.09(±0.00)	0.11(±0.05)	-0.09(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.07(±0.00)	0.10(±0.00)	0.03(±0.00)
	<b>R403</b>	-1.33(±0.05)	-56.93(±0.25)	53.21(±0.20)	-0.18(±0.01)	-5.22(±0.08)	1.41(±0.00)	-3.81(±0.08)
	<b>D405</b>	-0.22(±0.01)	52.00(±0.13)	-48.60(±0.12)	-0.01(±0.00)	3.18(±0.01)	0.65(±0.00)	3.83(±0.01)
	<b>E406</b>	-0.17(±0.00)	49.30(±0.13)	-46.13(±0.13)	-0.01(±0.00)	2.99(±0.01)	0.51(±0.00)	3.50(±0.01)
	<b>R408</b>	-0.14(±0.01)	-46.86(±0.16)	43.97(±0.15)	0.00(±0.00)	-3.03(±0.02)	0.64(±0.00)	-2.40(±0.02)
	<b>Q409</b>	-0.04(±0.00)	-1.07(±0.05)	1.05(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.07(±0.00)	0.11(±0.00)	0.04(±0.00)
	<b>K417</b>	-0.41(±0.10)	-52.94(±0.43)	49.36(±0.37)	-0.26(±0.01)	-4.26(±0.10)	2.56(±0.00)	-1.70(±0.10)
	<b>I418</b>	-0.05(±0.00)	-0.12(±0.01)	0.14(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.01(±0.00)
	<b>D420</b>	-0.02(±0.00)	40.38(±0.11)	-37.83(±0.10)	0.00(±0.00)	2.53(±0.01)	0.34(±0.00)	2.87(±0.01)
	<b>Y421</b>	-0.16(±0.00)	0.22(±0.07)	-0.13(±0.07)	0.00(±0.00)	-0.07(±0.00)	0.22(±0.00)	0.15(±0.00)
	<b>N422</b>	-0.03(±0.00)	-0.17(±0.02)	0.15(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.01(±0.00)
	<b>N437</b>	-0.05(±0.00)	-0.28(±0.02)	0.28(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.04(±0.00)	-0.02(±0.00)
	<b>N439</b>	-0.12(±0.00)	-0.19(±0.04)	0.21(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.09(±0.00)	-0.01(±0.00)
	<b>N440</b>	-0.02(±0.00)	0.34(±0.10)	-0.30(±0.09)	0.00(±0.00)	0.02(±0.00)	0.30(±0.00)	0.32(±0.00)
	<b>D442</b>	-0.01(±0.00)	41.83(±0.06)	-39.21(±0.06)	0.00(±0.00)	2.61(±0.00)	0.15(±0.00)	2.75(±0.00)
	<b>S443</b>	-0.02(±0.00)	-0.01(±0.03)	0.01(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.05(±0.00)	0.03(±0.00)
	<b>K444</b>	-0.05(±0.00)	-44.09(±0.14)	41.37(±0.14)	0.00(±0.00)	-2.77(±0.01)	0.47(±0.00)	-2.31(±0.01)
	<b>V445</b>	-0.21(±0.01)	-0.04(±0.01)	0.14(±0.01)	-0.01(±0.00)	-0.12(±0.01)	0.07(±0.00)	-0.06(±0.01)
	<b>N448</b>	-0.03(±0.00)	-0.23(±0.02)	0.22(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.03(±0.00)	0.00(±0.00)
	<b>Y449</b>	-1.40(±0.15)	-5.15(±0.15)	4.39(±0.10)	-0.50(±0.01)	-2.66(±0.13)	2.12(±0.00)	-0.54(±0.13)
	<b>Y451</b>	-0.04(±0.00)	-0.29(±0.02)	0.28(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.02(±0.00)
	<b>R452</b>	-0.09(±0.00)	-42.03(±0.12)	39.44(±0.12)	0.00(±0.00)	-2.68(±0.01)	0.46(±0.00)	-2.22(±0.01)
	<b>Y453</b>	-1.39(±0.05)	-1.16(±0.07)	1.51(±0.06)	-0.22(±0.00)	-1.25(±0.04)	0.50(±0.00)	-0.75(±0.04)
	<b>R454</b>	-0.05(±0.00)	-38.14(±0.08)	35.76(±0.08)	0.00(±0.00)	-2.42(±0.01)	0.16(±0.00)	-2.26(±0.01)
	<b>L455</b>	-3.48(±0.06)	-0.63(±0.03)	1.28(±0.03)	-0.44(±0.01)	-3.27(±0.06)	0.34(±0.00)	-2.93(±0.06)
	<b>F456</b>	-4.00(±0.10)	-0.87(±0.06)	1.98(±0.07)	-0.53(±0.01)	-3.42(±0.10)	1.45(±0.00)	-1.98(±0.10)
	<b>R457</b>	-0.02(±0.00)	-35.46(±0.08)	33.25(±0.07)	0.00(±0.00)	-2.24(±0.00)	0.13(±0.00)	-2.11(±0.00)

Delta

K458	-0.08(±0.01)	-34.34(±0.20)	32.23(±0.19)	-0.01(±0.00)	-2.19(±0.02)	0.60(±0.00)	-1.59(±0.02)
I472	-0.06(±0.00)	0.00(±0.01)	0.01(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)
Y473	-0.98(±0.03)	-0.81(±0.07)	1.04(±0.07)	-0.11(±0.01)	-0.86(±0.03)	0.45(±0.00)	-0.42(±0.03)
Q474	-0.10(±0.00)	-0.23(±0.03)	0.26(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.07(±0.00)	0.07(±0.00)	0.00(±0.00)
S477	-0.08(±0.02)	0.00(±0.08)	0.02(±0.06)	-0.02(±0.00)	-0.08(±0.02)	0.22(±0.00)	0.15(±0.02)
K478	-0.10(±0.01)	-38.36(±0.22)	36.01(±0.21)	0.00(±0.00)	-2.45(±0.02)	1.31(±0.00)	-1.14(±0.02)
C480	-0.03(±0.00)	0.53(±0.02)	-0.51(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)
V483	-0.02(±0.00)	-0.02(±0.01)	0.03(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.02(±0.00)	0.01(±0.00)
E484	-0.28(±0.02)	43.06(±0.18)	-40.22(±0.16)	-0.04(±0.01)	2.53(±0.02)	1.17(±0.00)	3.70(±0.02)
F486	-6.22(±0.12)	-1.46(±0.08)	3.30(±0.08)	-0.89(±0.02)	-5.27(±0.11)	1.59(±0.00)	-3.68(±0.11)
N487	-1.63(±0.12)	-1.23(±0.10)	1.03(±0.06)	-0.36(±0.00)	-2.19(±0.10)	1.70(±0.00)	-0.49(±0.10)
C488	-0.05(±0.00)	-0.96(±0.02)	0.96(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)
Y489	-6.20(±0.07)	0.46(±0.03)	0.40(±0.03)	-0.84(±0.01)	-6.18(±0.07)	0.70(±0.00)	-5.48(±0.07)
F490	-0.15(±0.00)	0.29(±0.01)	-0.18(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	-0.01(±0.00)	-0.05(±0.00)
P491	-0.04(±0.00)	0.41(±0.01)	-0.40(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.01(±0.00)
L492	-0.04(±0.00)	0.36(±0.01)	-0.36(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.07(±0.00)	0.03(±0.00)
Q493	-2.86(±0.17)	-10.39(±0.19)	8.11(±0.12)	-0.85(±0.01)	-5.99(±0.13)	2.87(±0.00)	-3.12(±0.13)
S494	-0.06(±0.00)	0.24(±0.07)	-0.21(±0.07)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.16(±0.00)	0.12(±0.00)
Y495	-0.27(±0.00)	-0.69(±0.01)	0.72(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.24(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.22(±0.00)
F497	-0.24(±0.00)	0.22(±0.02)	-0.35(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.37(±0.01)	0.05(±0.00)	-0.32(±0.01)
Q498	-2.69(±0.17)	-6.18(±0.13)	2.82(±0.07)	-0.57(±0.01)	-6.61(±0.13)	2.16(±0.00)	-4.46(±0.13)
P499	-0.23(±0.00)	0.15(±0.02)	-0.15(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.24(±0.01)	0.09(±0.00)	-0.14(±0.01)
T500	-0.63(±0.13)	-3.42(±0.10)	3.18(±0.05)	-0.32(±0.00)	-1.19(±0.10)	1.53(±0.00)	0.35(±0.10)
N501	-3.05(±0.05)	-2.97(±0.06)	2.59(±0.04)	-0.20(±0.00)	-3.64(±0.05)	0.64(±0.00)	-3.00(±0.05)
V503	-0.55(±0.03)	0.24(±0.01)	0.00(±0.02)	-0.07(±0.01)	-0.38(±0.03)	0.14(±0.00)	-0.23(±0.03)
Y505	-5.64(±0.13)	-3.59(±0.20)	3.67(±0.16)	-0.79(±0.02)	-6.35(±0.12)	1.84(±0.00)	-4.51(±0.12)
Q506	-0.40(±0.02)	-2.27(±0.03)	2.24(±0.02)	-0.02(±0.00)	-0.45(±0.02)	0.09(±0.00)	-0.36(±0.02)
P507	-0.05(±0.00)	0.05(±0.00)	-0.08(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)
Y508	-0.08(±0.00)	0.16(±0.05)	-0.14(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.09(±0.00)	0.03(±0.00)

---



**Table S2.** Energy terms of binding free energy of residues within 10 Å from the binding interface of ACE2 obtained by ASIE method (all values are in kcal/mol).

Systems	Residues	$\Delta\Delta E_{vdw}$	$\Delta\Delta E_{ele}$	$\Delta\Delta G_{gb}$	$\Delta\Delta G_{np}$	$\Delta\Delta H$	$-T\Delta\Delta S$	$\Delta\Delta G_{bind}$
WT	S19	0.19(±0.12)	-0.71(±0.08)	0.55(±0.05)	-0.09(±0.00)	-0.08(±0.10)	0.79(±0.00)	0.72(±0.10)
	T20	-0.04(±0.00)	-0.08(±0.01)	0.09(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.02(±0.00)
	I21	-0.19(±0.01)	-0.08(±0.01)	0.07(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.20(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.19(±0.01)
	E22	-0.03(±0.00)	-6.28(±0.07)	5.91(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.40(±0.00)	0.14(±0.00)	-0.26(±0.00)
	E23	-0.49(±0.03)	-9.44(±0.19)	9.10(±0.18)	-0.04(±0.01)	-0.87(±0.03)	0.91(±0.00)	0.04(±0.03)
	Q24	-3.04(±0.09)	-1.39(±0.08)	1.23(±0.05)	-0.43(±0.01)	-3.62(±0.08)	1.13(±0.00)	-2.50(±0.08)
	K26	-0.24(±0.02)	10.33(±0.25)	-9.62(±0.23)	-0.01(±0.00)	0.46(±0.01)	0.86(±0.00)	1.32(±0.01)
	T27	-2.26(±0.06)	-0.76(±0.03)	1.05(±0.03)	-0.41(±0.00)	-2.38(±0.07)	0.84(±0.00)	-1.54(±0.07)
	F28	-0.96(±0.03)	-0.64(±0.03)	0.84(±0.02)	-0.05(±0.00)	-0.81(±0.03)	0.06(±0.00)	-0.76(±0.03)
	L29	-0.08(±0.00)	-0.19(±0.01)	0.20(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.07(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.06(±0.00)
	D30	0.17(±0.13)	-19.78(±0.30)	17.87(±0.24)	-0.32(±0.01)	-2.05(±0.09)	2.83(±0.00)	0.78(±0.09)
	K31	-2.79(±0.13)	0.21(±0.22)	-0.82(±0.21)	-0.59(±0.01)	-4.00(±0.11)	2.81(±0.00)	-1.19(±0.11)
	F32	-0.10(±0.00)	-0.17(±0.01)	0.19(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.07(±0.00)
	N33	-0.07(±0.00)	0.53(±0.02)	-0.50(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.01(±0.00)
	H34	-5.17(±0.14)	-2.66(±0.13)	3.12(±0.10)	-0.82(±0.01)	-5.54(±0.13)	1.84(±0.00)	-3.70(±0.13)
	E35	-0.69(±0.12)	-7.58(±0.19)	6.79(±0.16)	-0.19(±0.00)	-1.67(±0.09)	2.10(±0.00)	0.43(±0.09)
	E37	-0.76(±0.11)	-14.70(±0.22)	13.62(±0.18)	-0.28(±0.01)	-2.12(±0.09)	2.11(±0.00)	-0.01(±0.09)
	D38	-1.11(±0.16)	-13.83(±0.16)	12.35(±0.13)	-0.49(±0.01)	-3.08(±0.13)	2.49(±0.00)	-0.59(±0.13)
	L39	-0.15(±0.00)	-0.21(±0.01)	0.21(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.14(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.13(±0.01)
	F40	-0.07(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.12(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
	Y41	-4.90(±0.10)	0.09(±0.09)	0.17(±0.06)	-0.50(±0.01)	-5.15(±0.11)	1.20(±0.00)	-3.95(±0.11)
	Q42	-1.64(±0.10)	-0.40(±0.12)	0.45(±0.10)	-0.32(±0.02)	-1.90(±0.11)	0.81(±0.00)	-1.09(±0.11)
	S43	-0.01(±0.00)	0.08(±0.01)	-0.06(±0.01)	0.00(±0.00)	0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.01(±0.00)
	S44	-0.01(±0.00)	0.22(±0.01)	-0.20(±0.01)	0.00(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	0.02(±0.00)
	L45	-1.00(±0.03)	0.27(±0.01)	-0.18(±0.01)	-0.08(±0.00)	-0.98(±0.03)	0.07(±0.00)	-0.91(±0.03)
	W48	-0.12(±0.00)	0.17(±0.02)	-0.15(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.08(±0.00)
	N49	-0.06(±0.00)	0.09(±0.02)	-0.04(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.03(±0.00)	0.01(±0.00)
	T52	-0.01(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.09(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)
	N61	-0.03(±0.00)	-0.08(±0.02)	0.11(±0.02)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.04(±0.00)	0.03(±0.00)
	K68	-0.08(±0.01)	5.94(±0.09)	-5.52(±0.08)	0.00(±0.00)	0.33(±0.01)	0.27(±0.00)	0.60(±0.01)
	W69	-0.06(±0.00)	-0.30(±0.01)	0.34(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.01(±0.00)
	F72	-0.14(±0.00)	-0.19(±0.01)	0.23(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.09(±0.00)
	E75	-0.13(±0.01)	-2.81(±0.09)	2.73(±0.08)	0.00(±0.00)	-0.20(±0.01)	0.29(±0.00)	0.09(±0.01)
	Q76	-0.21(±0.01)	-0.56(±0.03)	0.66(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.11(±0.00)	0.09(±0.00)	-0.02(±0.00)
	S77	0.00(±0.00)	0.05(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)
	T78	-0.04(±0.00)	0.07(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.02(±0.00)
	L79	-1.63(±0.06)	-0.07(±0.01)	0.43(±0.02)	-0.23(±0.01)	-1.50(±0.06)	0.40(±0.00)	-1.10(±0.06)
	Q81	-0.02(±0.00)	0.01(±0.01)	0.00(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)
	M82	-1.86(±0.07)	-0.03(±0.05)	0.52(±0.05)	-0.30(±0.01)	-1.68(±0.07)	0.59(±0.00)	-1.08(±0.07)
	Y83	-2.39(±0.11)	-2.20(±0.08)	2.21(±0.05)	-0.48(±0.01)	-2.86(±0.10)	1.50(±0.00)	-1.37(±0.10)
P84	-0.05(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	
E87	-0.02(±0.00)	-4.87(±0.04)	4.58(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.30(±0.00)	0.08(±0.00)	-0.23(±0.00)	
I88	-0.03(±0.00)	0.05(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	
L97	-0.06(±0.00)	0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	

L100	-0.04(±0.00)	0.11(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	
Q101	-0.02(±0.00)	0.19(±0.01)	-0.18(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	
M323	-0.02(±0.00)	0.19(±0.02)	-0.19(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.02(±0.00)	0.01(±0.00)	
T324	-0.23(±0.01)	0.18(±0.03)	-0.11(±0.03)	-0.02(±0.00)	-0.18(±0.02)	0.06(±0.00)	-0.13(±0.02)	
Q325	-0.24(±0.03)	-0.09(±0.04)	0.20(±0.04)	-0.03(±0.01)	-0.15(±0.02)	0.12(±0.00)	-0.03(±0.02)	
F327	-0.05(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	
W328	-0.03(±0.00)	0.11(±0.01)	-0.09(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.02(±0.00)	0.00(±0.00)	
E329	-0.10(±0.01)	-6.63(±0.06)	6.28(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.45(±0.01)	0.16(±0.00)	-0.29(±0.01)	
N330	-1.33(±0.04)	-0.19(±0.03)	0.51(±0.03)	-0.20(±0.00)	-1.21(±0.04)	0.29(±0.00)	-0.92(±0.04)	
S331	-0.01(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	
W349	-0.03(±0.00)	-0.52(±0.01)	0.53(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	
D350	-0.03(±0.00)	-7.28(±0.07)	6.86(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.45(±0.00)	0.09(±0.00)	-0.36(±0.00)	
L351	-0.24(±0.01)	0.03(±0.01)	-0.22(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.42(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.41(±0.01)	
K353	-3.76(±0.15)	8.32(±0.17)	-8.95(±0.14)	-0.55(±0.01)	-4.94(±0.13)	1.89(±0.00)	-3.05(±0.13)	
D355	-0.60(±0.14)	-12.02(±0.13)	10.68(±0.09)	-0.09(±0.00)	-2.03(±0.11)	2.06(±0.00)	0.03(±0.11)	
F356	-0.32(±0.01)	0.05(±0.02)	-0.02(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.30(±0.01)	0.02(±0.00)	-0.28(±0.01)	
R357	-1.31(±0.03)	9.04(±0.08)	-8.75(±0.07)	-0.10(±0.00)	-1.12(±0.03)	0.42(±0.00)	-0.70(±0.03)	
D382	-0.02(±0.00)	-6.85(±0.05)	6.45(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.42(±0.00)	0.10(±0.00)	-0.32(±0.00)	
M383	-0.06(±0.00)	-0.10(±0.05)	0.13(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.08(±0.00)	0.05(±0.00)	
Y385	-0.04(±0.00)	0.10(±0.01)	-0.10(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	
Q388	-0.04(±0.00)	-0.30(±0.02)	0.32(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.02(±0.00)	0.00(±0.00)	
P389	-0.06(±0.00)	0.02(±0.01)	0.00(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.03(±0.00)	
F390	-0.12(±0.00)	-0.07(±0.01)	0.08(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	
R393	-1.09(±0.04)	10.30(±0.10)	-9.82(±0.09)	-0.16(±0.01)	-0.76(±0.04)	0.60(±0.00)	-0.17(±0.04)	
S19	0.27(±0.08)	-0.67(±0.05)	0.51(±0.03)	-0.07(±0.00)	0.04(±0.07)	0.61(±0.00)	0.65(±0.07)	
T20	-0.32(±0.03)	-0.38(±0.03)	0.28(±0.02)	-0.05(±0.00)	-0.47(±0.03)	0.15(±0.00)	-0.32(±0.03)	
I21	-0.23(±0.01)	-0.10(±0.01)	0.11(±0.01)	-0.01(±0.00)	-0.23(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.22(±0.01)	
E22	-0.03(±0.00)	-8.29(±0.09)	7.79(±0.08)	0.00(±0.00)	-0.53(±0.01)	0.13(±0.00)	-0.40(±0.01)	
E23	-0.36(±0.02)	-11.10(±0.20)	10.59(±0.19)	-0.02(±0.00)	-0.89(±0.02)	0.68(±0.00)	-0.22(±0.02)	
Q24	-3.65(±0.12)	-2.17(±0.14)	1.79(±0.10)	-0.51(±0.01)	-4.55(±0.13)	1.43(±0.00)	-3.12(±0.13)	
K26	-0.20(±0.01)	12.17(±0.25)	-11.35(±0.23)	-0.01(±0.00)	0.61(±0.01)	0.87(±0.00)	1.48(±0.01)	
T27	-2.30(±0.07)	-0.69(±0.03)	0.98(±0.03)	-0.40(±0.00)	-2.41(±0.07)	0.79(±0.00)	-1.62(±0.07)	
F28	-1.07(±0.03)	-0.66(±0.03)	0.89(±0.02)	-0.05(±0.00)	-0.90(±0.03)	0.08(±0.00)	-0.82(±0.03)	
L29	-0.08(±0.00)	-0.27(±0.01)	0.28(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.07(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.06(±0.00)	
D30	-0.21(±0.11)	-22.11(±0.37)	20.25(±0.31)	-0.31(±0.02)	-2.37(±0.10)	2.57(±0.00)	0.20(±0.10)	
K31	-2.96(±0.12)	6.16(±0.26)	-6.30(±0.23)	-0.60(±0.01)	-3.71(±0.11)	2.89(±0.00)	-0.82(±0.11)	
L452R	F32	-0.10(±0.00)	-0.22(±0.01)	0.25(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.06(±0.00)
N33	-0.08(±0.00)	0.56(±0.03)	-0.53(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	
H34	-3.86(±0.10)	-1.08(±0.14)	1.83(±0.11)	-0.60(±0.01)	-3.70(±0.11)	1.26(±0.00)	-2.44(±0.11)	
E35	-0.42(±0.11)	-13.40(±0.19)	12.17(±0.17)	-0.18(±0.00)	-1.83(±0.08)	2.30(±0.00)	0.47(±0.08)	
E37	-0.70(±0.12)	-18.31(±0.28)	17.09(±0.24)	-0.27(±0.01)	-2.20(±0.10)	2.18(±0.00)	-0.01(±0.10)	
D38	-1.33(±0.15)	-18.95(±0.16)	16.76(±0.13)	-0.46(±0.01)	-3.97(±0.13)	2.65(±0.00)	-1.33(±0.13)	
L39	-0.14(±0.00)	-0.20(±0.01)	0.21(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.14(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.12(±0.01)	
F40	-0.07(±0.00)	-0.13(±0.00)	0.16(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	
Y41	-5.42(±0.10)	-0.32(±0.09)	0.36(±0.05)	-0.50(±0.01)	-5.88(±0.09)	1.36(±0.00)	-4.51(±0.09)	
Q42	-1.31(±0.08)	-0.15(±0.10)	0.27(±0.09)	-0.22(±0.02)	-1.41(±0.10)	0.58(±0.00)	-0.82(±0.10)	
S43	-0.01(±0.00)	0.11(±0.01)	-0.09(±0.01)	0.00(±0.00)	0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.02(±0.00)	
S44	-0.01(±0.00)	0.31(±0.01)	-0.29(±0.01)	0.00(±0.00)	0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.02(±0.00)	
L45	-0.94(±0.03)	0.34(±0.01)	-0.27(±0.01)	-0.07(±0.00)	-0.94(±0.04)	0.06(±0.00)	-0.89(±0.04)	

W48	-0.12(±0.00)	0.16(±0.02)	-0.15(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.11(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.08(±0.00)
N49	-0.06(±0.00)	0.17(±0.02)	-0.12(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.03(±0.00)	0.02(±0.00)
T52	-0.01(±0.00)	-0.11(±0.00)	0.11(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)
N61	-0.03(±0.00)	-0.16(±0.03)	0.18(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.05(±0.00)	0.04(±0.00)
K68	-0.07(±0.00)	9.83(±0.11)	-9.17(±0.10)	0.00(±0.00)	0.59(±0.01)	0.32(±0.00)	0.91(±0.01)
W69	-0.06(±0.00)	-0.57(±0.01)	0.60(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.02(±0.00)
F72	-0.13(±0.00)	-0.14(±0.01)	0.18(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.07(±0.00)
E75	-0.11(±0.01)	-6.04(±0.10)	5.76(±0.10)	0.00(±0.00)	-0.40(±0.01)	0.31(±0.00)	-0.08(±0.01)
Q76	-0.19(±0.00)	-0.44(±0.03)	0.54(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.08(±0.00)	-0.01(±0.00)
S77	0.00(±0.00)	0.15(±0.00)	-0.14(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)
T78	-0.02(±0.00)	0.12(±0.00)	-0.11(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)
L79	-1.44(±0.06)	-0.02(±0.01)	0.34(±0.01)	-0.19(±0.01)	-1.30(±0.06)	0.30(±0.00)	-1.00(±0.06)
Q81	-0.02(±0.00)	0.10(±0.01)	-0.09(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)
M82	-1.64(±0.06)	-0.07(±0.05)	0.53(±0.05)	-0.25(±0.01)	-1.44(±0.07)	0.45(±0.00)	-0.98(±0.07)
Y83	-2.37(±0.14)	-2.46(±0.07)	2.41(±0.04)	-0.53(±0.01)	-2.96(±0.11)	1.62(±0.00)	-1.34(±0.11)
P84	-0.05(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)
E87	-0.02(±0.00)	-6.72(±0.06)	6.31(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.42(±0.00)	0.09(±0.00)	-0.33(±0.00)
I88	-0.03(±0.00)	0.06(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)
L97	-0.06(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
L100	-0.04(±0.00)	0.13(±0.00)	-0.12(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)
Q101	-0.02(±0.00)	0.26(±0.01)	-0.25(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)
M323	-0.02(±0.00)	0.15(±0.03)	-0.15(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.04(±0.00)	0.02(±0.00)
T324	-0.21(±0.01)	0.31(±0.03)	-0.26(±0.03)	-0.01(±0.00)	-0.17(±0.01)	0.04(±0.00)	-0.13(±0.01)
Q325	-0.50(±0.06)	-0.17(±0.07)	0.35(±0.07)	-0.07(±0.01)	-0.39(±0.06)	0.29(±0.00)	-0.10(±0.06)
F327	-0.04(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.05(±0.00)
W328	-0.03(±0.00)	0.14(±0.02)	-0.13(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.02(±0.00)	0.01(±0.00)
E329	-0.15(±0.01)	-9.14(±0.09)	8.67(±0.09)	0.00(±0.00)	-0.63(±0.01)	0.22(±0.00)	-0.40(±0.01)
N330	-1.44(±0.04)	-0.24(±0.03)	0.53(±0.03)	-0.21(±0.00)	-1.36(±0.04)	0.33(±0.00)	-1.03(±0.04)
S331	-0.01(±0.00)	-0.03(±0.01)	0.02(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)
W349	-0.04(±0.00)	-0.70(±0.01)	0.71(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)
D350	-0.03(±0.00)	-10.10(±0.08)	9.50(±0.07)	0.00(±0.00)	-0.63(±0.01)	0.11(±0.00)	-0.53(±0.01)
L351	-0.26(±0.01)	0.04(±0.01)	-0.24(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.45(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.44(±0.01)
K353	-3.45(±0.16)	10.58(±0.16)	-11.84(±0.13)	-0.56(±0.01)	-5.27(±0.14)	2.35(±0.00)	-2.92(±0.14)
D355	-0.81(±0.12)	-14.99(±0.13)	13.50(±0.09)	-0.06(±0.00)	-2.37(±0.09)	1.99(±0.00)	-0.38(±0.09)
F356	-0.31(±0.01)	0.06(±0.02)	-0.05(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.30(±0.01)	0.02(±0.00)	-0.28(±0.01)
R357	-1.25(±0.03)	11.72(±0.07)	-11.26(±0.07)	-0.10(±0.00)	-0.89(±0.03)	0.46(±0.00)	-0.43(±0.03)
D382	-0.01(±0.00)	-8.87(±0.05)	8.33(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.55(±0.00)	0.08(±0.00)	-0.47(±0.00)
M383	-0.05(±0.00)	-0.11(±0.05)	0.12(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.09(±0.00)	0.05(±0.00)
Y385	-0.03(±0.00)	0.11(±0.01)	-0.11(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)
Q388	-0.03(±0.00)	-0.36(±0.02)	0.37(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.02(±0.00)	0.00(±0.00)
P389	-0.05(±0.00)	-0.04(±0.01)	0.05(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.03(±0.00)
F390	-0.11(±0.00)	-0.10(±0.01)	0.11(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.01)
R393	-0.91(±0.04)	13.39(±0.11)	-12.71(±0.10)	-0.13(±0.00)	-0.36(±0.04)	0.54(±0.00)	0.18(±0.04)
S19	0.11(±0.10)	-0.68(±0.07)	0.49(±0.05)	-0.10(±0.00)	-0.19(±0.09)	0.77(±0.00)	0.58(±0.09)
T20	-0.04(±0.00)	-0.07(±0.02)	0.08(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.02(±0.00)	0.00(±0.00)
I21	-0.20(±0.01)	-0.09(±0.01)	0.07(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.22(±0.01)	0(±0.00)	-0.21(±0.01)
E22	-0.03(±0.00)	-9.16(±0.06)	8.61(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.58(±0.00)	0.14(±0.00)	-0.44(±0.00)
E23	-0.41(±0.02)	-12.27(±0.16)	11.72(±0.15)	-0.03(±0.00)	-1.00(±0.02)	0.8(±0.00)	-0.20(±0.02)
Q24	-3.08(±0.10)	-1.69(±0.10)	1.48(±0.07)	-0.43(±0.01)	-3.71(±0.08)	1.14(±0.00)	-2.57(±0.08)

K26	-0.22(±0.01)	12.86(±0.20)	-11.99(±0.19)	-0.01(±0.00)	0.64(±0.01)	0.84(±0.00)	1.47(±0.01)
T27	-2.13(±0.07)	-0.60(±0.03)	0.89(±0.03)	-0.40(±0.00)	-2.24(±0.07)	0.83(±0.00)	-1.41(±0.07)
F28	-1.12(±0.04)	-0.69(±0.03)	0.93(±0.03)	-0.07(±0.00)	-0.94(±0.04)	0.11(±0.00)	-0.83(±0.04)
L29	-0.08(±0.00)	-0.19(±0.01)	0.20(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.06(±0.00)
D30	-0.19(±0.10)	-19.22(±0.38)	17.79(±0.32)	-0.20(±0.02)	-1.82(±0.09)	2.19(±0.00)	0.38(±0.09)
K31	-3.33(±0.12)	4.67(±0.31)	-4.76(±0.27)	-0.62(±0.01)	-4.03(±0.11)	2.56(±0.00)	-1.47(±0.11)
F32	-0.10(±0.00)	-0.20(±0.01)	0.22(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.07(±0.00)
N33	-0.07(±0.00)	0.54(±0.02)	-0.52(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.04(±0.00)	-0.01(±0.00)
H34	-4.48(±0.13)	-2.73(±0.15)	3.12(±0.12)	-0.67(±0.01)	-4.76(±0.14)	1.51(±0.00)	-3.25(±0.14)
E35	-0.88(±0.12)	-10.60(±0.19)	9.68(±0.17)	-0.22(±0.01)	-2.02(±0.10)	2.03(±0.00)	0.02(±0.10)
E37	-0.58(±0.12)	-17.17(±0.25)	15.96(±0.22)	-0.26(±0.01)	-2.05(±0.10)	2.32(±0.00)	0.27(±0.10)
D38	-0.75(±0.16)	-15.15(±0.26)	13.34(±0.19)	-0.42(±0.01)	-2.99(±0.14)	2.6(±0.00)	-0.39(±0.14)
L39	-0.15(±0.00)	-0.15(±0.01)	0.14(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.16(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.15(±0.01)
F40	-0.07(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.13(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0(±0.00)	-0.04(±0.00)
Y41	-5.10(±0.12)	-0.29(±0.12)	0.40(±0.07)	-0.49(±0.01)	-5.48(±0.13)	1.45(±0.00)	-4.02(±0.13)
Q42	-1.63(±0.09)	0.30(±0.13)	-0.23(±0.10)	-0.28(±0.02)	-1.85(±0.11)	0.69(±0.00)	-1.15(±0.11)
S43	-0.01(±0.00)	0.08(±0.01)	-0.07(±0.01)	0.00(±0.00)	0.01(±0.00)	0(±0.00)	0.01(±0.00)
S44	-0.01(±0.00)	0.21(±0.01)	-0.19(±0.01)	0.00(±0.00)	0.01(±0.00)	0(±0.00)	0.01(±0.00)
L45	-1.12(±0.04)	0.28(±0.01)	-0.17(±0.02)	-0.11(±0.01)	-1.11(±0.04)	0.08(±0.00)	-1.04(±0.04)
W48	-0.12(±0.00)	0.14(±0.02)	-0.13(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.08(±0.00)
N49	-0.06(±0.00)	0.11(±0.02)	-0.06(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.03(±0.00)	0.01(±0.00)
T52	-0.01(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.08(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0(±0.00)	-0.01(±0.00)
N61	-0.03(±0.00)	-0.11(±0.02)	0.13(±0.02)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.04(±0.00)	0.03(±0.00)
K68	-0.11(±0.01)	8.13(±0.10)	-7.58(±0.09)	0.00(±0.00)	0.44(±0.01)	0.26(±0.00)	0.70(±0.01)
W69	-0.06(±0.00)	-0.10(±0.02)	0.14(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)
F72	-0.15(±0.00)	-0.18(±0.01)	0.22(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.10(±0.00)
E75	-0.11(±0.01)	-6.64(±0.09)	6.31(±0.08)	0.00(±0.00)	-0.43(±0.01)	0.35(±0.00)	-0.08(±0.01)
Q76	-0.23(±0.01)	-0.56(±0.03)	0.66(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.12(±0.00)	0.08(±0.00)	-0.04(±0.00)
S77	0.00(±0.00)	0.09(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0(±0.00)	0.00(±0.00)
T78	-0.02(±0.00)	0.10(±0.01)	-0.09(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0(±0.00)	-0.01(±0.00)
L79	-1.67(±0.06)	-0.04(±0.01)	0.39(±0.01)	-0.22(±0.01)	-1.54(±0.06)	0.37(±0.00)	-1.16(±0.06)
Q81	-0.02(±0.00)	-0.04(±0.01)	0.05(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)
M82	-1.73(±0.06)	-0.08(±0.08)	0.52(±0.09)	-0.25(±0.01)	-1.55(±0.07)	0.64(±0.00)	-0.91(±0.07)
Y83	-2.61(±0.12)	-2.10(±0.07)	2.15(±0.04)	-0.53(±0.01)	-3.09(±0.11)	1.55(±0.00)	-1.53(±0.11)
P84	-0.06(±0.00)	0.06(±0.00)	-0.07(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.07(±0.00)	0(±0.00)	-0.06(±0.00)
E87	-0.02(±0.00)	-8.42(±0.06)	7.91(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.53(±0.00)	0.16(±0.00)	-0.37(±0.00)
I88	-0.03(±0.00)	0.05(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0(±0.00)	-0.03(±0.00)
L97	-0.06(±0.00)	0.05(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0(±0.00)	-0.04(±0.00)
L100	-0.04(±0.00)	0.12(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0(±0.00)	-0.02(±0.00)
Q101	-0.03(±0.00)	0.40(±0.01)	-0.39(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0(±0.00)	-0.01(±0.00)
M323	-0.02(±0.00)	-0.04(±0.04)	0.04(±0.04)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.03(±0.00)	0.01(±0.00)
T324	-0.20(±0.01)	0.42(±0.03)	-0.36(±0.02)	-0.01(±0.00)	-0.14(±0.01)	0.04(±0.00)	-0.10(±0.01)
Q325	-0.44(±0.05)	-0.19(±0.06)	0.37(±0.06)	-0.06(±0.01)	-0.33(±0.05)	0.24(±0.00)	-0.08(±0.05)
F327	-0.04(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0(±0.00)	-0.04(±0.00)
W328	-0.03(±0.00)	0.17(±0.02)	-0.16(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.02(±0.00)	0.00(±0.00)
E329	-0.14(±0.01)	-8.04(±0.08)	7.62(±0.08)	0.00(±0.00)	-0.55(±0.01)	0.2(±0.00)	-0.35(±0.01)
N330	-1.36(±0.04)	-0.16(±0.03)	0.47(±0.03)	-0.21(±0.00)	-1.27(±0.04)	0.3(±0.00)	-0.97(±0.04)
S331	-0.01(±0.00)	-0.03(±0.01)	0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0(±0.00)	-0.01(±0.00)
W349	-0.04(±0.00)	-0.59(±0.01)	0.60(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0(±0.00)	-0.02(±0.00)



D350	-0.03(±0.00)	-8.98(±0.07)	8.45(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.55(±0.00)	0.09(±0.00)	-0.46(±0.00)
L351	-0.25(±0.01)	0.01(±0.01)	-0.20(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.44(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.43(±0.01)
K353	-3.55(±0.17)	7.45(±0.18)	-8.78(±0.15)	-0.60(±0.01)	-5.47(±0.14)	2.49(±0.00)	-2.99(±0.14)
D355	-0.82(±0.13)	-12.96(±0.15)	11.70(±0.11)	-0.08(±0.00)	-2.16(±0.09)	1.66(±0.00)	-0.49(±0.09)
F356	-0.29(±0.01)	0.07(±0.02)	-0.05(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.28(±0.01)	0.02(±0.00)	-0.26(±0.01)
R357	-1.31(±0.03)	10.30(±0.08)	-9.92(±0.07)	-0.11(±0.00)	-1.03(±0.03)	0.48(±0.00)	-0.56(±0.03)
D382	-0.01(±0.00)	-8.44(±0.05)	7.93(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.52(±0.00)	0.09(±0.00)	-0.43(±0.00)
M383	-0.06(±0.00)	-0.25(±0.05)	0.27(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.1(±0.00)	0.06(±0.00)
Y385	-0.03(±0.00)	0.11(±0.01)	-0.11(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0(±0.00)	-0.03(±0.00)
Q388	-0.03(±0.00)	-0.40(±0.02)	0.42(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.02(±0.00)	0.00(±0.00)
P389	-0.05(±0.00)	0.01(±0.01)	0.01(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.03(±0.00)
F390	-0.12(±0.00)	-0.14(±0.01)	0.15(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.11(±0.00)	0(±0.00)	-0.11(±0.00)
R393	-1.07(±0.04)	12.49(±0.11)	-11.89(±0.10)	-0.16(±0.00)	-0.63(±0.04)	0.64(±0.00)	0.02(±0.04)
S19	0.04(±0.07)	-0.46(±0.06)	0.37(±0.04)	-0.06(±0.00)	-0.11(±0.06)	0.39(±0.00)	0.28(±0.06)
T20	-0.05(±0.00)	-0.06(±0.02)	0.08(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.03(±0.00)	0.00(±0.00)
I21	-0.21(±0.01)	-0.09(±0.01)	0.11(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.19(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.19(±0.01)
E22	-0.03(±0.00)	-11.22(±0.07)	10.54(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.71(±0.00)	0.16(±0.00)	-0.55(±0.00)
E23	-0.36(±0.02)	-14.70(±0.18)	13.98(±0.17)	-0.03(±0.00)	-1.11(±0.02)	0.80(±0.00)	-0.31(±0.02)
Q24	-3.29(±0.10)	-1.91(±0.09)	1.79(±0.07)	-0.52(±0.01)	-3.93(±0.08)	1.39(±0.00)	-2.53(±0.08)
K26	-0.19(±0.01)	15.26(±0.22)	-14.26(±0.20)	-0.01(±0.00)	0.81(±0.01)	0.87(±0.00)	1.68(±0.01)
T27	-2.09(±0.07)	-0.64(±0.03)	0.90(±0.03)	-0.36(±0.00)	-2.19(±0.07)	0.78(±0.00)	-1.41(±0.07)
F28	-1.05(±0.03)	-0.70(±0.03)	0.94(±0.02)	-0.05(±0.00)	-0.86(±0.03)	0.05(±0.00)	-0.80(±0.03)
L29	-0.07(±0.00)	-0.26(±0.01)	0.27(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.05(±0.00)
D30	-0.09(±0.09)	-22.89(±0.35)	21.15(±0.30)	-0.21(±0.01)	-2.04(±0.09)	2.20(±0.00)	0.16(±0.09)
K31	-3.03(±0.13)	9.41(±0.24)	-9.44(±0.23)	-0.61(±0.01)	-3.66(±0.11)	2.92(±0.00)	-0.74(±0.11)
F32	-0.10(±0.00)	-0.25(±0.01)	0.27(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.07(±0.00)
N33	-0.07(±0.00)	0.61(±0.02)	-0.58(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.01(±0.00)
H34	-3.47(±0.08)	-1.06(±0.12)	1.79(±0.10)	-0.49(±0.01)	-3.22(±0.08)	0.97(±0.00)	-2.25(±0.08)
E35	-0.77(±0.11)	-16.60(±0.18)	15.26(±0.16)	-0.19(±0.00)	-2.31(±0.09)	2.25(±0.00)	-0.05(±0.09)
E37	-0.75(±0.11)	-20.80(±0.30)	19.31(±0.25)	-0.29(±0.01)	-2.52(±0.11)	2.12(±0.00)	-0.40(±0.11)
D38	-0.89(±0.16)	-19.42(±0.16)	17.28(±0.13)	-0.44(±0.01)	-3.48(±0.13)	2.95(±0.00)	-0.53(±0.13)
L39	-0.17(±0.01)	-0.14(±0.01)	0.15(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.16(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.15(±0.01)
F40	-0.06(±0.00)	-0.13(±0.00)	0.16(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
Y41	-4.80(±0.10)	0.06(±0.09)	0.20(±0.06)	-0.52(±0.01)	-5.06(±0.10)	1.20(±0.00)	-3.86(±0.10)
Q42	-1.91(±0.11)	-1.73(±0.11)	0.73(±0.07)	-0.42(±0.01)	-3.32(±0.10)	1.15(±0.00)	-2.17(±0.10)
S43	-0.01(±0.00)	0.06(±0.02)	-0.04(±0.01)	0.00(±0.00)	0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.02(±0.00)
S44	-0.01(±0.00)	0.25(±0.01)	-0.23(±0.01)	0.00(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	0.02(±0.00)
L45	-1.17(±0.04)	0.29(±0.01)	-0.18(±0.01)	-0.13(±0.01)	-1.19(±0.04)	0.09(±0.00)	-1.10(±0.04)
W48	-0.11(±0.00)	0.19(±0.02)	-0.17(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.03(±0.00)	-0.06(±0.00)
N49	-0.06(±0.00)	0.13(±0.03)	-0.08(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.04(±0.00)	0.02(±0.00)
T52	-0.01(±0.00)	-0.10(±0.00)	0.10(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)
N61	-0.03(±0.00)	-0.17(±0.03)	0.19(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.04(±0.00)	0.04(±0.00)
K68	-0.09(±0.01)	11.79(±0.10)	-11.01(±0.10)	0.00(±0.00)	0.68(±0.01)	0.31(±0.00)	0.99(±0.01)
W69	-0.06(±0.00)	-0.61(±0.01)	0.64(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.03(±0.00)
F72	-0.15(±0.00)	-0.16(±0.01)	0.22(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.09(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.08(±0.00)
E75	-0.13(±0.01)	-9.38(±0.11)	8.89(±0.10)	0.00(±0.00)	-0.61(±0.01)	0.43(±0.00)	-0.18(±0.01)
Q76	-0.23(±0.01)	-0.61(±0.03)	0.72(±0.03)	0.00(±0.00)	-0.12(±0.00)	0.06(±0.00)	-0.07(±0.00)
S77	0.00(±0.00)	0.12(±0.00)	-0.12(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)
T78	-0.03(±0.00)	0.17(±0.00)	-0.15(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)

Delta

L79	-1.74(±0.05)	0.01(±0.01)	0.36(±0.01)	-0.24(±0.01)	-1.60(±0.05)	0.35(±0.00)	-1.25(±0.05)
Q81	-0.02(±0.00)	-0.02(±0.01)	0.03(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.01(±0.00)	0.00(±0.00)
M82	-1.79(±0.06)	-0.14(±0.08)	0.61(±0.09)	-0.26(±0.01)	-1.58(±0.07)	0.62(±0.00)	-0.96(±0.07)
Y83	-2.50(±0.12)	-2.21(±0.07)	2.21(±0.04)	-0.53(±0.01)	-3.03(±0.10)	1.62(±0.00)	-1.41(±0.10)
P84	-0.06(±0.00)	0.04(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.06(±0.00)
E87	-0.02(±0.00)	-10.17(±0.07)	9.55(±0.06)	0.00(±0.00)	-0.63(±0.00)	0.17(±0.00)	-0.47(±0.00)
I88	-0.03(±0.00)	0.05(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)
L97	-0.06(±0.00)	0.06(±0.01)	-0.04(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)
L100	-0.04(±0.00)	0.15(±0.00)	-0.14(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)
Q101	-0.02(±0.00)	0.46(±0.01)	-0.45(±0.01)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)	0.00(±0.00)
M323	-0.02(±0.00)	-0.10(±0.05)	0.10(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.03(±0.00)	0.01(±0.00)
T324	-0.19(±0.01)	0.29(±0.03)	-0.22(±0.03)	-0.01(±0.00)	-0.13(±0.01)	0.04(±0.00)	-0.09(±0.01)
Q325	-0.64(±0.07)	-0.19(±0.07)	0.40(±0.07)	-0.10(±0.01)	-0.53(±0.07)	0.36(±0.00)	-0.17(±0.07)
F327	-0.04(±0.00)	-0.05(±0.00)	0.05(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)
W328	-0.03(±0.00)	0.19(±0.02)	-0.16(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.02(±0.00)	0.01(±0.00)
E329	-0.10(±0.01)	-9.96(±0.08)	9.41(±0.08)	0.00(±0.00)	-0.65(±0.01)	0.23(±0.00)	-0.42(±0.01)
N330	-1.31(±0.04)	-0.22(±0.03)	0.52(±0.03)	-0.20(±0.00)	-1.21(±0.04)	0.29(±0.00)	-0.91(±0.04)
S331	-0.01(±0.00)	-0.03(±0.01)	0.03(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.01(±0.00)
W349	-0.03(±0.00)	-0.70(±0.01)	0.70(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.03(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)
D350	-0.03(±0.00)	-11.39(±0.07)	10.71(±0.07)	0.00(±0.00)	-0.71(±0.01)	0.10(±0.00)	-0.60(±0.01)
L351	-0.24(±0.01)	0.01(±0.01)	-0.20(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.43(±0.01)	0.01(±0.00)	-0.43(±0.01)
K353	-4.45(±0.14)	10.81(±0.14)	-12.39(±0.12)	-0.60(±0.01)	-6.63(±0.12)	2.33(±0.00)	-4.30(±0.12)
D355	-0.44(±0.12)	-15.56(±0.13)	14.06(±0.10)	-0.09(±0.00)	-2.03(±0.10)	1.94(±0.00)	-0.09(±0.10)
F356	-0.29(±0.01)	0.10(±0.02)	-0.10(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.28(±0.01)	0.02(±0.00)	-0.27(±0.01)
R357	-1.13(±0.04)	12.79(±0.08)	-12.24(±0.07)	-0.09(±0.00)	-0.67(±0.04)	0.39(±0.00)	-0.28(±0.04)
D382	-0.01(±0.00)	-10.15(±0.05)	9.53(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.63(±0.00)	0.08(±0.00)	-0.55(±0.00)
M383	-0.06(±0.00)	-0.22(±0.05)	0.23(±0.05)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.08(±0.00)	0.03(±0.00)
Y385	-0.03(±0.00)	0.12(±0.01)	-0.12(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)
Q388	-0.03(±0.00)	-0.42(±0.02)	0.43(±0.02)	0.00(±0.00)	-0.02(±0.00)	0.02(±0.00)	-0.01(±0.00)
P389	-0.05(±0.00)	0.01(±0.01)	0.00(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.04(±0.00)	0.01(±0.00)	-0.03(±0.00)
F390	-0.10(±0.00)	-0.17(±0.01)	0.18(±0.01)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)	0.00(±0.00)	-0.08(±0.00)
R393	-0.69(±0.04)	14.72(±0.12)	-13.98(±0.11)	-0.08(±0.00)	-0.04(±0.04)	0.55(±0.00)	0.51(±0.04)