



Residues	NEA		FDB	
	Buried	Exposed	Buried	Exposed
ALA	0.00	0.00	0.00	0.00
CYS	-0.89	-2.57	-1.06	-1.64
THR	-5.31	-8.075	-4.84	-6.68
SER	-5.55	-6.55	-4.45	-5.24
ASP	-17.26	-22.06	-14.56	-18.82
GLU	-16.12	-20.68	-14.52	-18.21
ASN	-16.38	-20.41	-14.02	-17.80
GLN	-14.00	-18.41	-13.14	-16.61
HID	11.21	6.95	10.85	8.13
HIE	10.63	6.15	10.41	7.37
HIP	15.17	10.72	12.86	10.98
ARG	-53.40	-57.36	-51.37	-54.76
LYS	-8.20	-12.34	-8.24	-11.35
ILE	6.76	3.44	5.50	3.06
VAL	0.43	-2.19	-0.05	-1.66
LEU	0.52	-3.72	0.00	-2.94
MET	-1.61	-3.21	-2.85	-3.09
PHE	1.86	-2.68	0.17	-3.18
TRP	-0.23	-7.67	-1.94	-5.53
TYR	-5.10	-10.90	-5.91	-10.14

TABLE 1 – Les énergies de référence obtenues avec l’optimisation 6 protéines.

NHREF	Y	F	L	I	A	L	L	V	V	V	I	V	L	V
	24	26	28	39	48	53	59	62	67	75	79	86	88	90
INAD	F	I	I	I	A	L	I	L	V	V	I	I	L	I
	28	30	32	50	59	65	71	74	79	87	91	98	100	102
GRIP	L	I	I	I	A	I	I	I	L	A	L	V	L	I
	682	684	686	698	707	713	719	722	727	735	739	746	748	750
Syntenin	V	F	F	I	A	L	I	I	V	I	L	V	I	I
	209	211	213	218	227	232	238	241	246	254	258	265	267	269
DLG2	L	F	I	V	A	L	L	V	L	A	L	V	L	V
	203	205	207	224	233	239	245	248	253	261	265	272	274	276
PSD95	L	F	I	I	A	L	I	V	L	A	L	V	I	A
	323	325	327	338	347	353	359	362	367	375	379	386	388	390
CASK	M	I	L	V	I	L	I	I	V	L	L	I	F	I
	501	503	505	515	524	530	536	539	544	552	556	563	565	567
Tiam1	Y	F	L	V	A	L	I	I	A	L	L	L	L	V
	858	860	862	875	884	889	895	898	903	911	915	920	922	924