

Diagram illustrating the structure of the backbone file, with labels pointing to specific columns:

- position
- type d'acide aminé 3 lettres
- type d'acide aminé 1 lettre
- numéro du rotamère

489	ALA	A	1	-10.894700	-0.128508	0	3.230323E-02
489	ASP	D	1	-19.499700	-0.347171	0.240545	-8.92156
489	ASP	D	2	-19.499700	4.864217E-02	0.589668	-7.68253
489	ASP	D	3	-19.499700	-1.71946	0.357956	-7.90181
489	ASP	D	4	-19.499700	5.546893E-02	-0.971609	-7.62914
489	ASP	D	5	-19.499700	-2.12676	-0.596958	-7.42771
489	ASN	N	1	-17.001400	-0.492971	-0.520301	-5.98663
489	ASN	N	2	-17.001400	-0.596737	-0.549191	-5.64477

énergie de référence

VdW

élec

ASA

le fichier backbone

Diagram illustrating the structure of the pair energy file, with labels pointing to specific columns:

- position i
- type d'acide aminé de i
- position j
- type d'acide aminé de j

490	HIS	489	ALA		
1	1		-0.351215	0	0.406196
2	1		-0.340499	0	0.824753
3	1		-0.110147	0	0.242977
4	1		-0.112336	0	5.777122E-02
5	1		-0.39638	0	0.148099
6	1		-0.19973	0	0.214374
7	1		-0.189721	0	0.34835
8	1		-0.115124	0	0.134858
9	1		-0.167919	0	0.188942
490	HIS	489	ASP		
1	1		-0.45112	0.107382	0.264577
1	2		-0.561025	-2.779489E-02	0.275176
1	3		-0.603197	-4.988197E-02	0.607285
1	4		-2.42051	0.413431	5.08406
1	5		-3.24513	0.405399	5.07537
2	1		-0.438257	-0.175936	0.664548
2	2		-0.547936	-6.606574E-02	0.665577
2	3		-0.591824	-4.68311E-02	0.888732

VdW, élec, ASA

3ème rotamère de l'ASP à la position 489

2ème rotamère de l'HIS à la position 490

fichier d'énergies de paires