

Diagram illustrating the fields in the backbone file:

- 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

termes énergétiques

le fichier backbone

Diagram illustrating the fields in the pair energy file:

- 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	

termes énergétiques

3ème rotamère de l'ASP à la position 489

2ème rotamère de l'HIS à la position 490

fichier d'énergies de paires