

identifiant énergie optimisée

#id time m(G1+G2) G1[5] G2[1] Temperature=0.65  
0 2 -70.1239 180 132 3 147 2 132  
1 3 -70.6378 179 132 3 147 2 132  
2 1 -72.1208 179 133 3 147 2 120

nombre de pas

rotamères

identifiant

énergie optimisée

#id m(G1+G2) G1 G2 Temperature=0.65  
0 -70.1239 -56.1865 -13.9374  
1 -70.6378 -56.7004 -13.9374  
2 -72.1208 -57.8632 -14.2576

énergies des groupes

identifiant

> 0 backbone: (null)  
AA/ F K L K D K  
SEQ/ 489 490 491 492 493 490  
ROT/ 3 21 4 36 3 21

séquence d'acides aminés

positions

rotamères