

表 5.12: G 四聯體各層與各股位置的機械強度量化值  $k^{clst} \pm \sigma^{clst}$ 。全原子分子動力學模擬在 haENM 中， $k^{clst} \pm \sigma^{clst}$  代表包含機械熱點原子對  $\{a_i a_j\}^{clst}$  的均值  $k_{ij}$  對於各時窗  $n$  的平均與標準差值， $\{a_i a_j\}^{clst}$  係指子群 hb 中於圖論分析中重要原子對 (圖 5.20)。殘基對  $r_i r_j$  的各層各股位置標號，四分體層  $L(r_i)$  (因為  $r_i = r_j$ ) 以 top, mid, bot 標記，G 股象限  $Q(r_i)$  (因為  $Q(r_i) = Q(r_j)$ ) 以 Q3, Q2, Q1, Q4 標記。

system		Q3	Q2	Q1	Q4
Propeller	top-cap	0.32 $\pm$ 0.18 (G2A1)			0.25 $\pm$ 0.19 (G20A1)
	top-groove				
	mid-groove	0.21 $\pm$ 0.29 (G3A7)			
	bot-groove	0.30 $\pm$ 0.44 (G4A7)			
	bot-cap				
Basket	top-cap	1.96 $\pm$ 1.25 (G2A1)			
	top-groove				
	mid-groove				
	bot-groove				3.73 $\pm$ 0.51 (G16T17)
	bot-cap	3.93 $\pm$ 0.19 (G4T6)			5.44 $\pm$ 0.37 (G16A19)
Chair	top-cap		5.59 $\pm$ 0.95 (G10A13)		3.31 $\pm$ 1.56 (G22A1)
	top-groove		3.57 $\pm$ 0.53 (G10T11)		
	mid-groove				
	bot-groove				
	bot-cap	3.12 $\pm$ 0.86 (G4T6)		3.12 $\pm$ 0.88 (G16T18)	
Hybrid-I	top-cap	1.01 $\pm$ 0.56 (G2A1)		6.41 $\pm$ 0.51 (G16A19)	2.14 $\pm$ 1.02 (G20A1)
	top-groove			3.33 $\pm$ 0.45 (G16T17)	
	mid-groove				
	bot-groove				
	bot-cap		4.00 $\pm$ 0.25 (G10T11)	2.10 $\pm$ 0.58 (G14A13)	2.47 $\pm$ 0.75 (G22A13)
Hybrid-II	top-cap	3.63 $\pm$ 0.70 (G2A1)	3.72 $\pm$ 1.29 (G10T11)	2.96 $\pm$ 0.38 (G14A13)	
	top-groove				
	mid-groove			2.81 $\pm$ 1.79 (G15T18)	
	bot-groove				
	bot-cap				