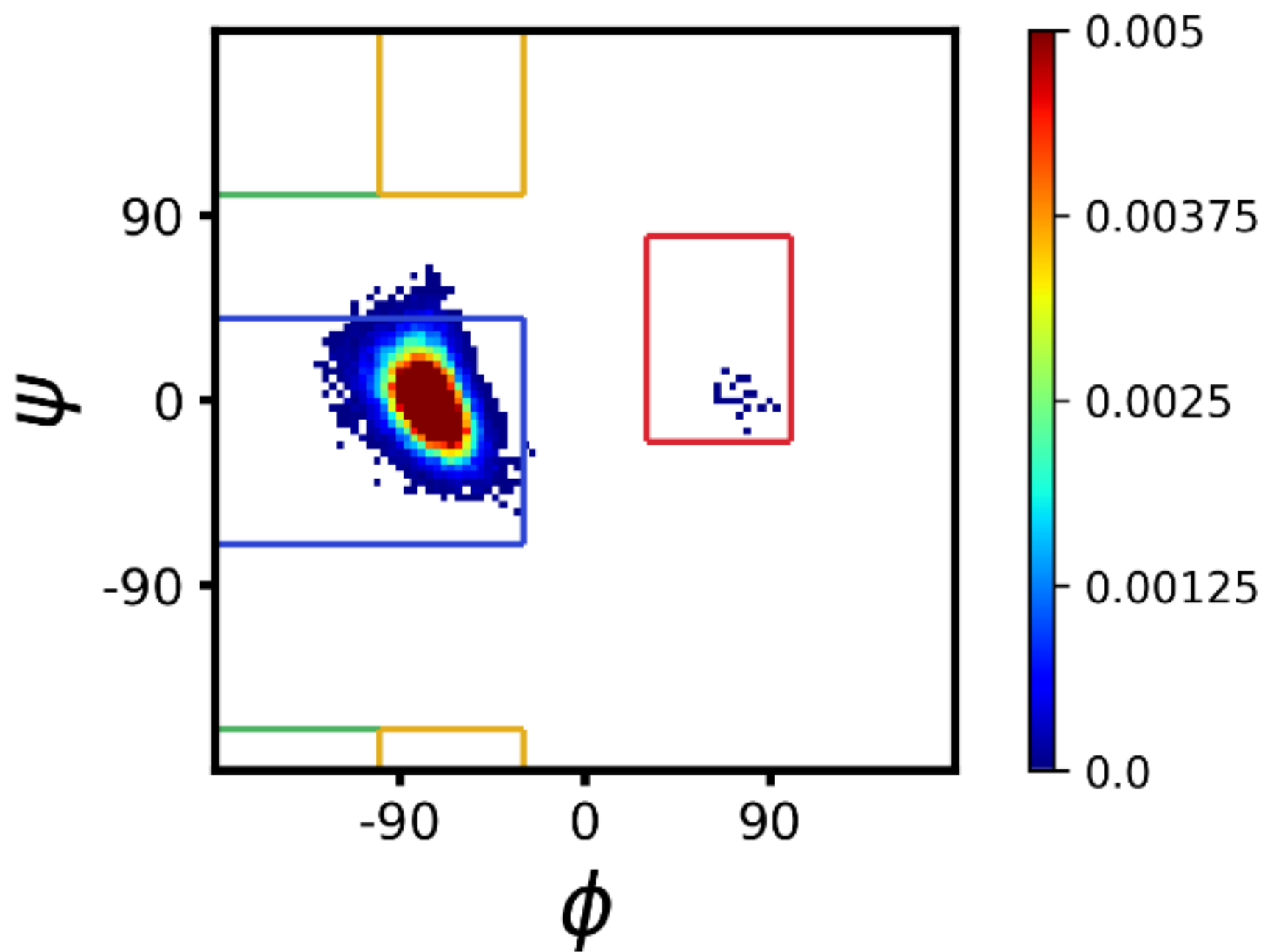


G7



Original

~~ϕ/ψ~~ distribution of G_7 from cyclo-(SESEG4)

Conformer Probability

AA	P_{II}	β	α_R	α_L
P	0.80	0.00	0.15	0.00
A	0.46	0.23	0.21	0.02
L	0.43	0.21	0.26	0.02
M	0.40	0.24	0.21	0.03
E	0.40	0.22	0.28	0.03
I	0.39	0.36	0.20	0.00
W	0.39	0.26	0.23	0.03
C	0.38	0.31	0.18	0.03
V	0.37	0.39	0.19	0.00
F	0.35	0.33	0.20	0.03
Q	0.35	0.26	0.26	0.04
Y	0.34	0.32	0.21	0.03
R	0.34	0.27	0.26	0.04
K	0.34	0.26	0.29	0.04
S	0.33	0.25	0.33	0.02
H	0.30	0.30	0.22	0.06
T	0.29	0.28	0.38	0.00
D	0.29	0.09	0.43	0.05
N	0.24	0.15	0.30	0.13
G	0.21	0.09	0.09	0.27

Zhu, C.-Y., Jiang, F. & Mu, Y.-D. *J. Phys. Chem. B* **119**, 10355-1047 (2015)

Linkersequenzen selection

informed by a's intrinsic propensity

Background

Project Description

Results

Conclusion

Conformer Definition

Conformer Probability

AA	P_{II}	β	α_R	α_L
D	0.29	0.09	0.43	0.05
T	0.29	0.28	0.38	0.00
S	0.33	0.25	0.33	0.02
N	0.24	0.15	0.30	0.13
K	0.34	0.26	0.29	0.04
E	0.40	0.22	0.28	0.03
L	0.43	0.21	0.26	0.02
Q	0.35	0.26	0.26	0.04
R	0.34	0.27	0.26	0.04
W	0.39	0.26	0.23	0.03
H	0.30	0.30	0.22	0.06
A	0.46	0.23	0.21	0.02
M	0.40	0.24	0.21	0.03
Y	0.34	0.32	0.21	0.03
I	0.39	0.36	0.20	0.00
F	0.35	0.33	0.20	0.03
V	0.37	0.39	0.19	0.00
C	0.38	0.31	0.18	0.03
P	0.80	0.00	0.15	0.00
G	0.21	0.09	0.09	0.27