

Anhang B: Parameter

In diesem Teil des Anhanges ist der Parameterfile aufgeführt, in dem für α ,D-Glucose die Atome, deren Ladungen, Bindungen und einige interne Koordinaten angegeben ist. Im unteren Teil steht der Patch, in dem die Änderungen aufgeführt sind, die sich bei einer $\alpha(1 \rightarrow 4)$ -Bindung für die beiden beteiligten α ,D-Glucosen ergeben.

```
RESI GLUC 0.00 ! alpha Glucose
GROUP
ATOM C1 CT 0.285
ATOM H1 HA 0.082
ATOM O1 OT -.719
ATOM HO1 HO 0.485
GROUP
ATOM C2 CT 0.085
ATOM H2 HA 0.085
ATOM O2 OT -.628
ATOM HO2 HO 0.420
GROUP
ATOM C3 CT 0.358
ATOM H3 HA 0.052
ATOM O3 OT -.671
ATOM HO3 HO 0.420
GROUP
ATOM C4 CT 0.096
ATOM H4 HA 0.016
ATOM O4 OT -.694
ATOM HO4 HO 0.485
GROUP
ATOM C5 CT 0.352
ATOM H5 HA 0.040
ATOM O5 OE -.578
GROUP
ATOM C6 CT 0.271
ATOM H61 HA 0.020
ATOM H62 HA 0.020
ATOM O6 OT -.686
ATOM HO6 HO 0.404
BOND C1 C2 C2 C3 C3 C4 C4 C5 C5 O5 O5 C1
BOND C1 H1 C1 O1 O1 HO1 C2 O2 O2 HO2 C3 H3 C3 O3
BOND O3 HO3 C6 H61 C6 H62 C6 O6 O6 HO6
BOND C4 H4 C4 O4 O4 HO4 C5 H5 C5 C6 C2 H2
DONOR HO1 O1
```

DONOR HO2 O2
 DONOR HO3 O3
 DONOR HO4 O4
 DONOR HO6 O6
 ACCE O1
 ACCE O2
 ACCE O3
 ACCE O4
 ACCE O5
 ACCE O6
 IC O1 C1 C2 C3 1.41 108.24 -64.68 109.89 1.55
 IC H1 C1 C2 C3 1.11 112.08 169.11 109.89 1.55
 IC O5 C1 C2 C3 1.40 112.35 54.80 109.89 1.55
 IC O1 C1 C2 H2 1.41 108.24 174.22 108.60 1.12
 IC O1 C1 C2 O2 1.41 108.24 62.42 112.29 1.40
 IC C1 C2 C3 C4 1.56 109.89 -55.17 108.99 1.56
 IC H2 C2 C3 C4 1.12 110.60 64.73 108.99 1.56
 IC O2 C2 C3 C4 1.40 113.32 178.31 108.99 1.56
 IC C1 C2 C3 H3 1.56 109.89 67.35 111.32 1.12
 IC C1 C2 C3 O3 1.56 109.89 -179.81 111.74 1.40
 IC C2 C3 C4 C5 1.55 108.99 53.35 110.47 1.56
 IC H3 C3 C4 C5 1.12 110.80 -69.47 110.47 1.56
 IC O3 C3 C4 C5 1.40 112.26 177.70 110.47 1.56
 IC C2 C3 C4 H4 1.55 108.99 -68.64 110.16 1.12
 IC C2 C3 C4 O4 1.55 108.99 170.77 105.99 1.43
 IC C3 C4 C5 C6 1.56 110.47 -168.70 113.03 1.55
 IC H4 C4 C5 C6 1.12 110.21 -46.74 113.03 1.55
 IC O4 C4 C5 C6 1.43 108.57 75.48 113.03 1.55
 IC C3 C4 C5 H5 1.56 110.47 70.22 109.55 1.12
 IC C3 C4 C5 O5 1.56 110.47 -50.54 113.00 1.43
 IC C4 C5 C6 O6 1.56 113.03 54.03 114.08 1.40
 IC H5 C5 C6 O6 1.12 108.47 175.73 114.08 1.40
 IC O5 C5 C6 O6 1.43 104.30 -69.10 114.08 1.40
 IC C4 C5 C6 H61 1.56 113.03 -61.81 110.57 1.11
 IC C4 C5 C6 H62 1.56 113.03 179.13 110.14 1.11
 IC C5 C6 O6 HO6 1.55 114.08 65.15 107.43 0.95
 IC H61 C6 O6 HO6 1.11 103.26 -174.81 107.43 0.95
 IC H62 C6 O6 HO6 1.11 110.62 -59.69 107.43 0.95
 IC C4 C5 O5 C1 1.56 113.00 51.72 117.12 1.40
 IC H5 C5 O5 C1 1.12 108.23 -69.79 117.12 1.40
 IC C6 C5 O5 C1 1.55 104.30 174.86 117.12 1.40
 IC C5 O5 C1 O1 1.43 117.12 65.83 108.26 1.41
 IC C5 O5 C1 H1 1.43 117.12 -173.90 102.12 1.11
 IC C5 O5 C1 C2 1.43 117.12 -53.63 112.35 1.56
 IC C2 C3 O3 HO3 1.55 111.74 54.77 108.04 0.95
 IC H3 C3 O3 HO3 1.12 101.60 173.56 108.04 0.95
 IC C4 C3 O3 HO3 1.56 112.26 -68.04 108.04 0.95
 IC C1 C2 O2 HO2 1.56 112.29 -66.85 107.96 0.95

```
IC H2 C2 O2 HO2 1.12 101.81 177.17 107.96 0.95
IC C3 C2 O2 HO2 1.55 113.32 58.39 107.96 0.95
IC H1 C1 O1 HO1 1.11 113.72 -42.75 0.00 5.07
IC C2 C1 O1 HO1 1.56 108.24 -168.02 0.00 5.07
IC O5 C1 O1 HO1 1.40 108.26 68.96 0.00 5.07
IC C3 C4 O4 HO4 1.55 107.06 168.54 106.17 0.95
IC H4 C4 O4 HO4 1.12 109.84 49.32 106.17 0.95
IC C5 C4 O4 HO4 1.55 110.48 -72.63 106.17 0.95
```

```
PRES AL14 0.036
```

```
! Aldose link ALPHA 1-4
```

```
DELETE ATOM 1O1 COMB 2O4
```

```
DELETE ATOM 1HO1
```

```
DELETE ATOM 2HO4
```

```
GROUP
```

```
ATOM 1C1 CT 0.399
```

```
ATOM 1H1 HA 0.082
```

```
GROUP
```

```
ATOM 2C4 CT 0.096
```

```
ATOM 2H4 HA 0.016
```

```
ATOM 2O4 OT -.557
```

```
DELETE ACCE 2O4
```

```
IC 2C3 2C4 2O4 1C1 1.56 109.83 90.22 116.75 1.41
IC 2H4 2C4 2O4 1C1 1.12 111.16 -32.27 116.75 1.41
IC 2C5 2C4 2O4 1C1 1.56 104.29 -151.37 116.75 1.41
IC 2C4 2O4 1C1 1C2 1.43 116.75 -158.68 108.24 1.56
IC 2C4 2O4 1C1 1H1 1.43 116.75 -33.43 113.72 1.11
IC 2C4 2O4 1C1 1O5 1.43 116.75 79.30 108.26 1.40
```