

Liaison entre ARG et ligand QVR (urgu)

1. Dans Coot: Calculate, Module... CCP4. Dans l'onglet CCP4, Make Link via Acedrg. Cliquer successivement sur les 2 atomes à lier, ce qui entraîne la création des fichiers acedrg-link-from-coot-ARG-QVR_link.* . Le fichier acedrg-link-from-coot-ARG-QVR_link-hack.cif est utilisé pour l'affinement dans Phenix en lieu et place du fichier QVR.cif. Attention à vérifier que les atomes d'hydrogène à supprimer dans le fichier PDB après la création de la liaison sont ceux notés "delete" dans le fichier cif.
2. Dans Phenix, Refinement settings, Model interpretation, choisir "Add link to CIF" Data link: ARG-QVR, Residue selection 1: (chain 'E' and resid 17), Residue selection 2: (chain 'E' and resid 501).

From:

<https://bsi.inscog.eu/> - **BSI wiki**

Permanent link:

https://bsi.inscog.eu/doku.php?id=creation_d_une_liaison_arg-ligand&rev=1641978858

Last update: **2023/11/01 20:14**

