

回复

回复全部

转发

删除

彻底删除

举报

拒收

标记为... ▼

移动到... ▼

symmetry aware pair generator example ☆

发件人: **Pavel Afonine** <pafonine@lbl.gov> 

时 间: 2019年5月28日(星期二) 下午3:55

收件人: Wang Wensong <wang_wensong@qq.com>

附 件: 3 个 ( 4gif_part.pdb...)

Link to explore symmetry:

http://cci.lbl.gov/cctbx/cctbx_web.cgi

4gif_part.pdb contains 5 H bonds (4 symmetry and 1 ordinary).

run.py generates all plausible pairs (some are redundant).

附件(3 个)

普通附件  全部下载 全部收藏



4gif_part.pdb (4.69K)

预览 下载 收藏 转存 ▼



run.py (2.89K)

预览 下载 收藏 转存 ▼



Screen Shot 2019-05-28 at 15.55.20.png (335.57K)

预览 下载 收藏 转存 ▼