

BioStation  
BioStationViewer Open Ver.1 Rev.11

ユーザマニュアル

2019年2月

## 目次

1 機能概要.....	1
2 使用方法.....	2
2.1 起動方法.....	2
2.2 メニューの説明.....	2
2.2.1 File ファイル操作.....	3
2.2.2 Viewpoint 視点操作.....	17
2.2.3 Model 表示形式指定.....	19
2.2.4 Color 色指定.....	25
2.2.5 Selection 選択指定.....	26
2.2.6 Tool ツール機能.....	27
2.2.7 Monitor モニター機能.....	36
2.2.8 Edit 編集機能.....	44
2.2.9 Preferences プリファレンス指定.....	44
2.2.10 Help ヘルプ機能.....	50
2.3 断面指定.....	51
2.4 トラジェクトリー機能.....	53
2.4.1 ファイル形式.....	53
2.4.2 表示指定.....	55
2.5 VISCANA 機能.....	59
2.6 IFIE MAP 表示機能.....	64
2.7 FILM 等値面表示.....	74
2.8 ABINIT-MP 入力ファイル作成.....	79
2.8.1 File メニュー.....	79
2.8.2 フラグメント編集機能 (FMOCNTRL).....	80
2.8.3 フラグメントペア指定 (FRAGPAIR).....	88
2.9 基本動作.....	89
2.9.1 表示の拡大、縮小、回転、移動.....	89
2.9.2 分子構造の座標の回転、移動.....	89
2.9.3 可視化領域の制御.....	89
2.10 対象選択方法.....	91
2.11 表示形式等の指定.....	92
2.12 解析領域表示指定.....	93
2.13 Molda.....	95

2.13.1 DNA 構造作成.....	95
2.13.2 RNA 構造作成.....	98
2.13.3 DNA 塩基置換.....	100
2.13.4 RNA 塩基置換.....	104
2.13.5 DNA 塩基補完.....	108
2.13.6 RNA 塩基補完.....	121
3 使用例.....	126
3.1 ABINIT-MP 計算結果表示.....	126
3.1.1 分子構造表示.....	126
3.1.2 色付けを変更した表示.....	129
3.1.3 ラベル表示.....	131
3.1.4 電子密度の等値面表示.....	132
3.1.5 電子密度の等値面上に静電ポテンシャルの値により色付けした表示.....	133
3.1.6 静電ポテンシャルの等値面表示.....	134
3.1.7 分子軌道の等値面表示.....	135
3.1.8 電場ベクトルの表示.....	136
3.2 エストロゲン受容体ーリガンド複合体の構造表示例.....	139
3.2.1 ペプチド鎖の C $\alpha$ line 表示.....	139
3.2.2 ペプチド鎖の C $\alpha$ line 表示+リガンド表示形式変更.....	140
3.2.3 ペプチド鎖の C $\alpha$ line 表示+リガンド表示+選択した残基の表示.....	143
3.2.4 リガンド+荷電残基表示.....	145
3.2.5 リガンド周辺表示と距離表示.....	147
3.3 フラグメント間相互作用エネルギー表示例.....	149
3.3.1 ファイル入力.....	149
3.3.2 フラグメント間相互作用エネルギー表示の指定.....	150
3.3.3 閾値を指定して表示.....	151
3.3.4 指定したフラグメント間の相互作用エネルギー表示.....	152
3.4 重ね合わせ操作例.....	153
3.4.1 ファイル入力.....	153
3.4.2 すべてのC $\alpha$ を用いた指定による重ね合わせ.....	154
3.4.3 指定した残基内の原子(C $\alpha$ )指定による重ね合わせ.....	154
3.5 水素付加の操作例.....	157
3.6 フラグメント間相互作用エネルギー 多対1の例.....	159
3.7 トラジェクトリー表示例.....	160
3.7.1 グリシンの例.....	160
3.7.2 SI8の例.....	161

3.7.3	トラジェクトリー表示の動画ファイルを作成	162
3.8	結晶系の表示例	165
3.8.1	ファイルの読み込み、等値面の表示	165
3.8.2	周期表示	166
3.8.3	断面の表示	166
3.8.4	ボンドの表示	169
3.9	CHPI プログラム使用例	170
3.9.1	CH/ $\pi$ 相互作用の探索方法	170
3.9.2	入力パラメータ編集	171
3.9.3	PI 情報ファイル編集	174
3.9.4	起動	178
3.10	CNS 形式の電子密度グリッドデータの解析例	180
3.10.1	AJF ファイルの作成例	180
3.10.2	CNS 形式の電子密度グリッドデータの表示例	181
3.10.3	タンパク質周囲の電子密度のみを抽出する例	181
3.10.4	タンパク質周囲の電子密度のみを抽出する例	183
4	チュートリアル	184
4.1	(Gly) <sub>10</sub> の分子内相互作用解析	184
4.1.1	構造作成	184
4.1.2	構造最適化	185
4.1.3	計算実行	186
4.1.4	計算結果	189
4.2	受容体タンパク質と低分子リガンド化合物との結合性解析	192
4.2.1	受容体-リガンド立体構造データのダウンロード	193
4.2.2	BioStation Viewer で A 鎖のみに編集	194
4.2.3	ERD より主鎖を補完	194
4.2.4	原子欠損のある残基を Molda のポイントミュレーション機能で置き換える	196
4.2.5	水素付加、構造最適化を実行	196
4.2.6	ABINIT-MP 入力ファイル作成	198
4.3	アライメント指定の VISCANA 機能	199
4.3.1	CPF ファイルの準備	199
4.3.2	配列データの取得	199
4.3.3	配列データの編集	201
4.3.4	アラインメントデータの取得	202
4.3.5	アラインメントデータの編集	204
4.3.6	アラインメントデータの配置	205



4.3.7 VISCANA 実行 .....	206
4.4 フラグメント手動指定(リガンド 4 分割) .....	210
4.4.1 PDB 読み込み .....	210
4.4.2 フラグメント自動生成 .....	210
4.4.3 リガンド編集の表示設定 .....	210
4.4.4 新しいフラグメントの設定 .....	211
4.4.5 アラインメントデータの編集 .....	213
4.4.6 AJF ファイル出力 .....	214
4.5 フラグメント手動指定(タンパク質と共有結合しているリガンドの BDA 設定) .....	216
4.5.1 PDB の読み込み .....	216
4.5.2 自動分割実行 .....	216
4.5.3 フラグメント番号を確認 .....	217
4.5.4 対象フラグメントだけを表示 .....	217
4.5.5 BDA 設定 .....	218
4.5.6 Formal Charg の設定 .....	218
4.5.7 AJF ファイル出力 .....	219
5 超分子計算 .....	220
6 構造最適化のオプション .....	223
7 インストール .....	227
7.1 配布形式 .....	227
7.2 システムのインストール .....	227
7.3 動作環境 .....	227
7.4 ファイルの取得 .....	227
7.5 Reduce の設定 .....	228
7.6 Babel の設定 .....	229
7.7 Bond Builder の使用方法 .....	230
7.8 TINKER の設定 .....	231
8 謝辞 .....	232
9 参考文献 .....	234

## 1 機能概要

BioStationViewer の主な機能は、

- 1) タンパク質の分子構造の表示
  - 2) 電子密度、静電ポテンシャル、分子軌道の等値面、断面表示
  - 3) 電子密度等値面上に静電ポテンシャルの値による色付けした表示
  - 4) 分子構造の編集
  - 5) フラグメント間相互作用解析の表示
  - 6) 電場ベクトルの表示
  - 7) 分子構造の時系列変化のアニメーション表示
- です。

図 1.1 に電子密度等値面上に静電ポテンシャルの値により色付けした表示例を示します。

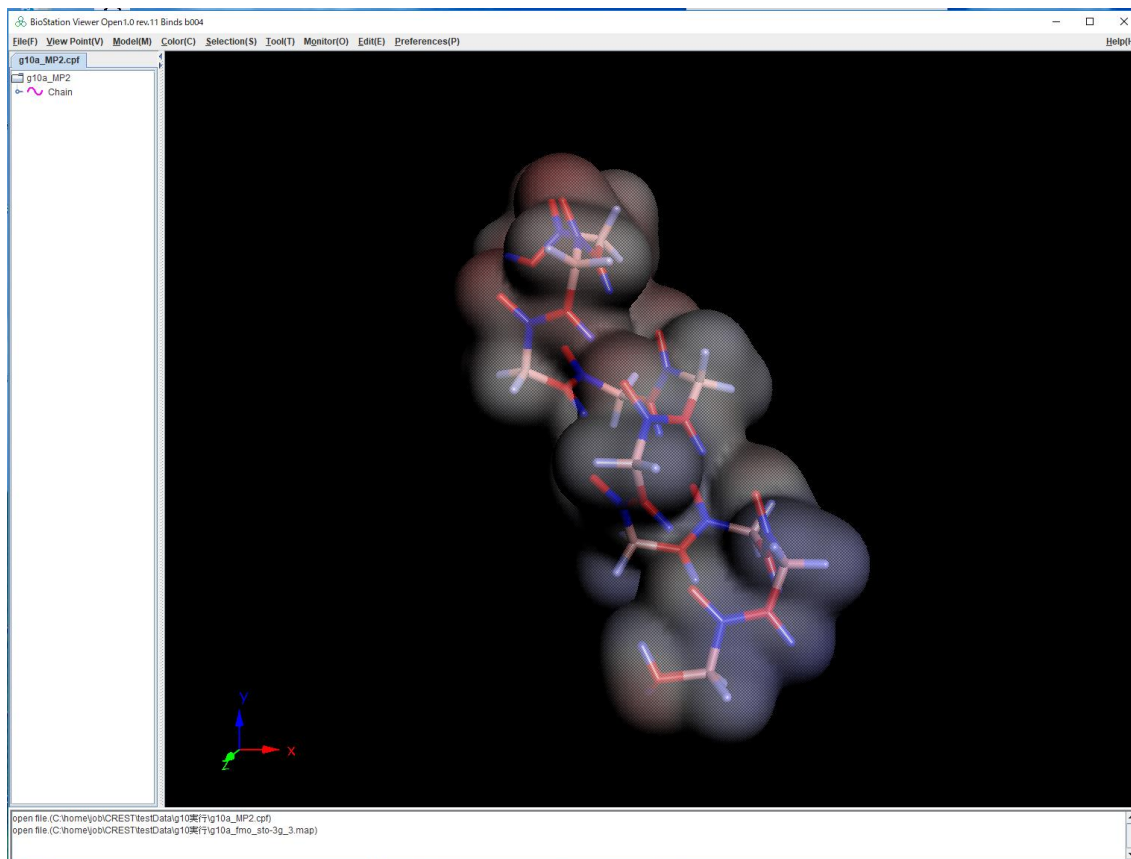


図 1.1 電子密度等値面上に静電ポテンシャルの値により色付けした表示例

## 2 使用方法

### 2.1 起動方法



デスクトップのアイコンをダブルクリックして起動します。起動画面を図 2.1 に示します。左側に分子構造を Tree 図で表示し、右側に 3D 表示します。メニューバーより表示指定のメニューを表示し、各種指定を行えます。Tree 図は、チェーン、残基、原子の階層で表示されます。Tree 図をピックすると、該当の原子等がハイライトされ、表示されている構造をピックすると該当する Tree 図中の原子等がハイライトされます。下部にはメッセージが表示されます。

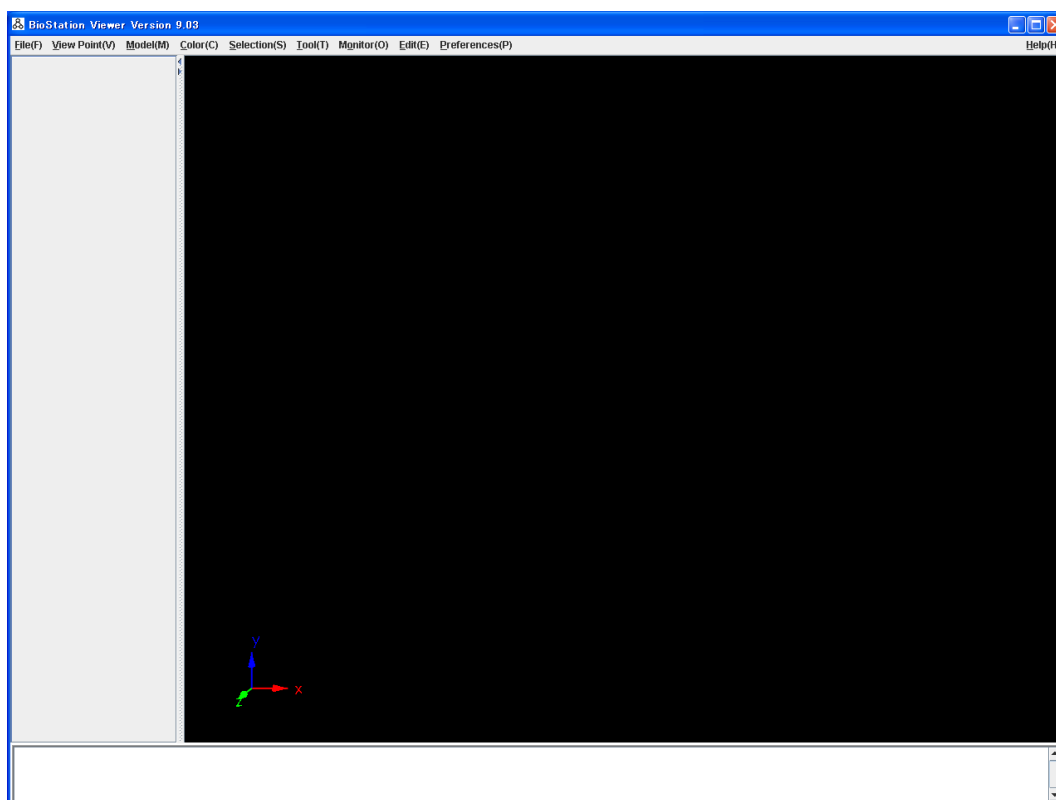


図 2.1 メイン画面

### 2.2 メニューの説明

メイン画面のメニューの説明をします。



図 2.2 メニュー

## 2.2.1 File ファイル操作



図 2.3 File メニュー

- ◆ **Open** PDB ファイル (\*.pdb,\*ent)、ABINIT-MP Check Point File(\*.cpf)、ABINIT-MP Grid File(\*.den,\*esp,\*map,\*mo,\*efv)、MOL2 ファイル(\*.mol2)、MDL ファイル(\*.mol, \*.mdl),Gaussian Cube ファイル(\*.cube,\*cub), Gaussian output ファイル (\*.gout),XYZ ファイル (\*.xyz), Mopac input/output ファイル (\*.min,\*arc),トラジェクトリーファイル(\*.trj,\*tr2,\*tj2,trj2)、Pno ファイル(\*.pno),表示属性ファイル(\*.prof)を読みます。各ファイルの仕様は以下の URL より参照してください

ABINIT-MP : <http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/result/software>

PDBファイル: [http://www.rcsb.org/pdb/docs/format/pdbguide2.2/guide2.2\\_frame.html](http://www.rcsb.org/pdb/docs/format/pdbguide2.2/guide2.2_frame.html)

MOL2 ファイル: <http://www.tripos.com/custResources/mol2Files>

MDL ファイル: [http://www.chm.tu-dresden.de/edv/vamp65/REFERS/vr\\_03d.htm](http://www.chm.tu-dresden.de/edv/vamp65/REFERS/vr_03d.htm)

Gaussian Cube ファイル: <http://www.gaussian.com> の G03 Manual Pages  
Gaussian output ファイル

XYZ ファイル: 初めに原子数、コメント、その後原子数分1行に原子記号、x座標、y座標、z座標が記述された形式。拡張として、BioStation Viewer では、座標の後ろに x,y,z のベクトル量を指定して、原子ごとのベクトル表示が可能です。ベクトルの表示属性の変更は Preference 指定の Arrow を参照してください。

Mopac input/output ファイル: Dewar, M. J. S., Thiel, W., J. Am. Chem. Soc., 1977, 99, 4899, 3907

トラジェクトリーファイル:2.4.1 参照

Pno ファイル:<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/result/software> 参照

表示属性ファイル:BioStation Viewer の表示属性(構造ファイル(pdb,cpf)、色、モード等を記述。読み込むとその記述属性により表示する)

### 1) 分子構造ファイル

PDB ファイル、ABINIT-MP Check Point File、MOL2 ファイル、MDL ファイル、XYZ ファイル、Gaussian output ファイル、Mopac input/output ファイルを読み込んだ場合は分子構造が表示されます。読み込んだ後の表示形式は、原子の数が 300 より少ない場合は Stick、300 以上の場合は CA(Line)になります。

### 2) ABINIT-MP Grid File、Gaussian Cube ファイル

ABINIT-MP Grid File の拡張子の意味は、

- i) den: 電子密度
- ii) esp: 静電ポテンシャル
- iii) map: 電子密度の等値面上に静電ポテンシャルをマップしたファイル
- iv) mo: 分子軌道
- v) efv: 電場ベクトル

です。ABINIT-MP Grid File を読み込んだ場合には、表示する等値面を指定します。Gaussian Cube ファイルの場合は、そのファイルが電子密度、静電ポテンシャル、分子軌道の指定、周期表示時の境界の値の補填指定をおこない、そのそれぞれの表示指定を行います。Periodical grid value は、格子データを周期表示した場合に、端の境界1セル分を補って表示する場合は on に、補わない場合は off にします。指定画面を図 2.4 に示します。

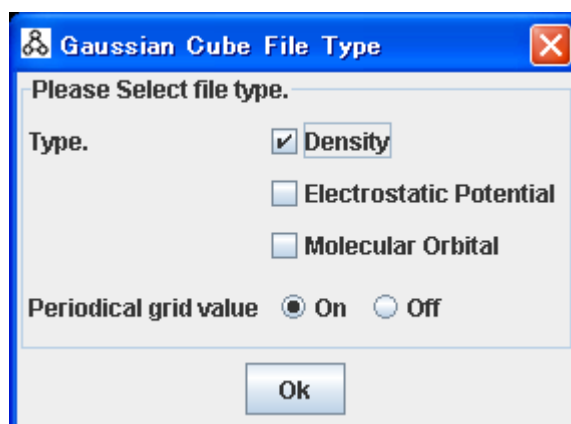


図 2.4 Gaussian Cube ファイルの指定画面

### 3) 電子密度の表示指定

電子密度指定画面を図 2.5 に示します。表示する等値面の値、色、透明度、格子データ領域の表示、断面を指定します。色付けの方法は2つあり、単一で指定する方法と、最小値、最大値を指定しその範囲で色を割り当て、指定された値の色で表示する方法があります。範囲で指定した場合は値の低→高に合わせて、青→緑→赤と変化します。図 2.6 に単一色のカラー選択画面を示します。

Section の”Set”ボタンをクリックすると断面の指定画面が表示されます。断面指定の説明は、2.3 節に示します。

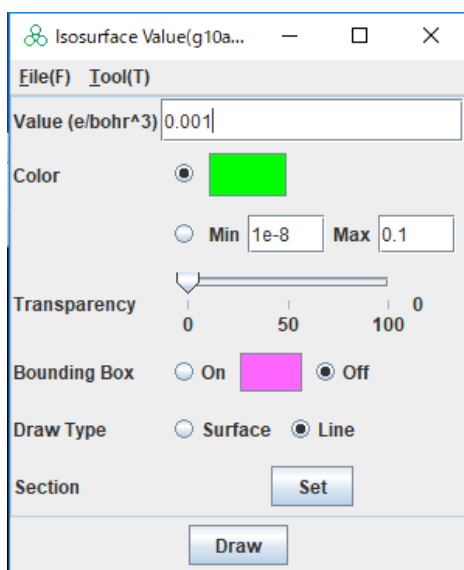


図 2.5 等値面の指定画面



図 2.6 カラー選択画面

#### 4) マップファイル、静電ポテンシャルの指定

マップファイルの場合には、表示する等値面の値、静電ポテンシャルの値の範囲を指定します。指定画面を図 2.7 に示します。デフォルトでは値が高→低の変化に合わせて、表示色が赤→白→青に変化します。値の範囲指定のボタンを”Min Max(red,blue)”にすると表示色が青→白→赤に変化します。

静電ポテンシャルの場合は指定された値の±の2つの等値面を表示します。

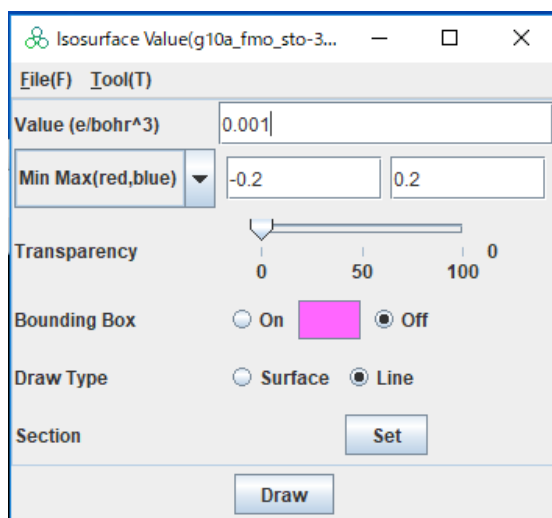


図 2.7 マップファイル、静電ポテンシャルの指定画面

## 5) 分子軌道表示の指定

分子軌道の場合は各軌道のエネルギーのグラフが表示されます。グラフ表示画面を図 2.8 に示します。グラフ上にマウスを移動すると、軌道番号、エネルギーの値がグラフの下に表示されます。グラフをクリックすると、Mo No.にその軌道番号が設定されます。ここに、軌道番号を直接入力することも可能です。Draw ボタンをクリックすると指定された値の±の等値面を表示します。

”+”、“-”ボタンをクリックすることによりグラフの拡大縮小が可能です。Line Width でグラフの太さを指定できます。等値面の色は、カラー選択画面で指定可能です。また、Color(-,+)は Color(+,-)と変更可能で、選択されたときに±の色が入れ替わります。色付けする値の範囲を Min,Max で指定します。Transparency で透明度を指定します。Section で断面を指定します。

Gaussian Cube ファイルの場合はエネルギーの値がないので、複数の軌道の記述がある場合は、1から順にグラフが表示されます。

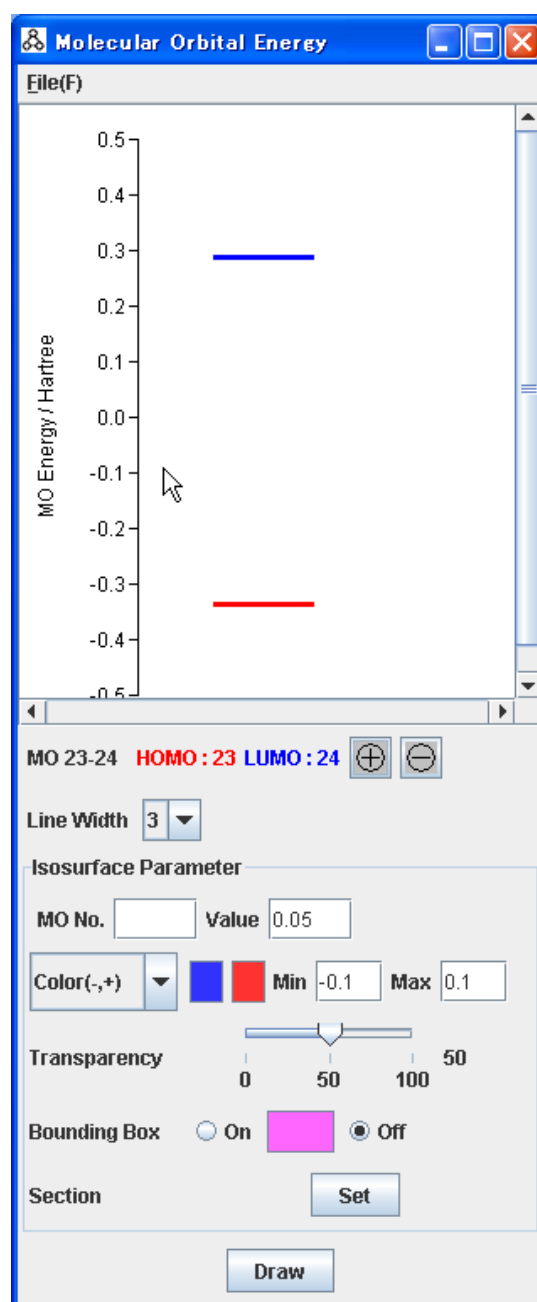


図 2.8 分子軌道の等値面指定画面



## 6) 電場ベクトルの表示指定

電場ベクトルファイルを読み込むと図 2.9 に示す指定画面が表示され、3D 表示にはデフォルトの表示指定での電場ベクトルが表示されます。電場ベクトルは、指定された等値面上の点を基準として表示されます。表示指定を以下に説明します。

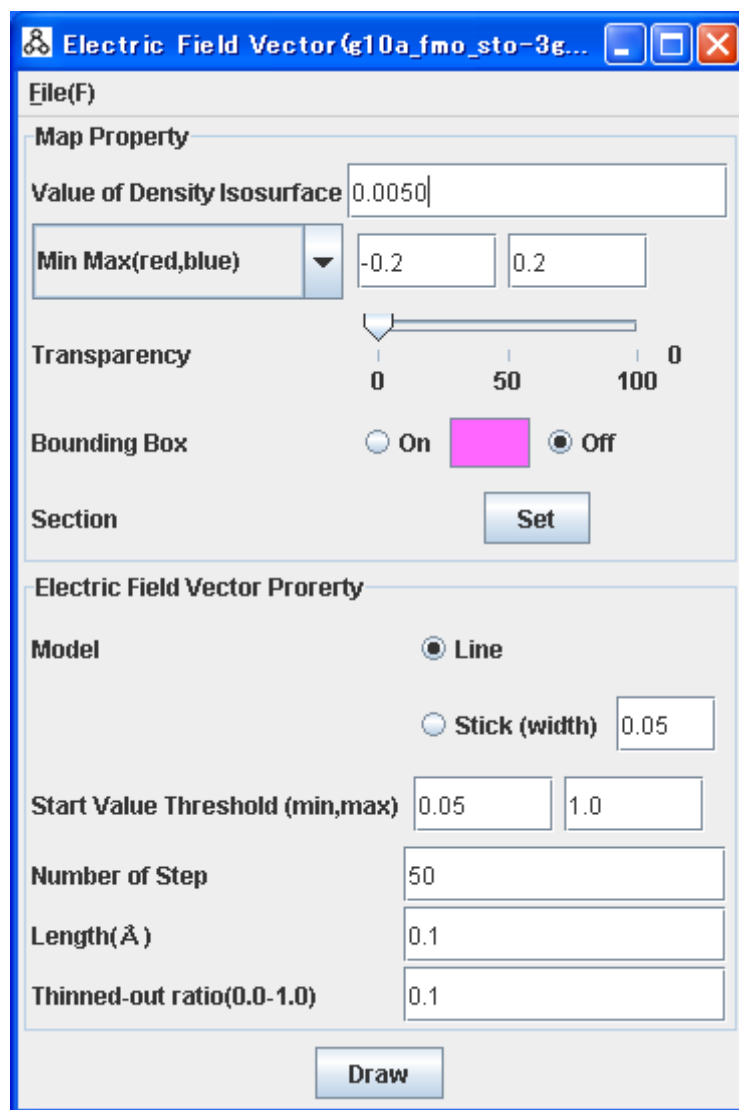


図 2.9 電場ベクトル指定画面

- Map Property 電場ベクトル表示の元となる等値面の指定をおこないます
  - Value of Density Isosurface  
表示する電子密度の等値面の値を指定します。
  - Min Max(blue,red)/ (red,blue)  
等値面上に色付けする静電ポテンシャルの値を指定します。デフォルトでは値が高→低の変化に合わせて、表示色が赤→白→青に変化します。値の範囲指定の

ボタンを”Min Max(red,blue)”にすると表示色が青→白→赤に変化します。

- **Transparency**  
透明度を指定します。
- **Bounding Box**  
格子データの境界の表示の有無を指定します。
- **Section**  
Set ボタンをクリックすると断面指定画面が表示されます。断面指定は 2.3 節で説明します。
- **Electric Field Vector Property** 電場ベクトル表示の指定をおこないます
  - **Model**  
表示形式を Line, Stick から選択します。Stick の場合は Stick の太さを指定します。
  - **Start Value Threshold(min,max)**  
電場ベクトルの開始点となる等値面上の点の静電ポテンシャルの値の範囲を指定します。
  - **Numbet of Step**  
電場ベクトルの表示ステップ数を指定します。ここで指定されたステップ数の回数だけ繰り返し計算しベクトルを表示します。
  - **Length(Å)**  
1ステップあたりの長さ
  - **Thinned-out ratio (0.0-1.0)**  
開始点の間引きの割合。0~1 で指定します。

- **Draw** 指定された値で電場ベクトルを表示します。

**注意！** Stick の場合表示する数を多くすると、Viewer が異常終了する場合があります。原因は究明中です。

## 7) トラジェクトリーファイル

時系列で分子構造が変化の様子をアニメーション表示します。詳細は 2.4 節に説明します。

## 8) Pno(Pair Natural Orbital)グリッドファイル

軌道ペアの等値面を表示します。ファイルを入力すると、ファイルに記述されていた軌道ペアごとに表示指定が表示されます。それぞれ緩和エネルギー、Hole 軌道の占有数、Particle 軌道の占有数が表示されます。ペアの表示、Hole 軌道、Particle 軌道、Hole 軌道→Particle 軌道の格子領域の重心を結ぶ Vector の表示の有無を指定できます。Select All ですべてのペアを選択できます。Unselect All ですべての選択を解除します。”Apply” ボタンをクリックすると指定の様式で表示されます。図 2.10、図 2.11 に指定画面を示します。

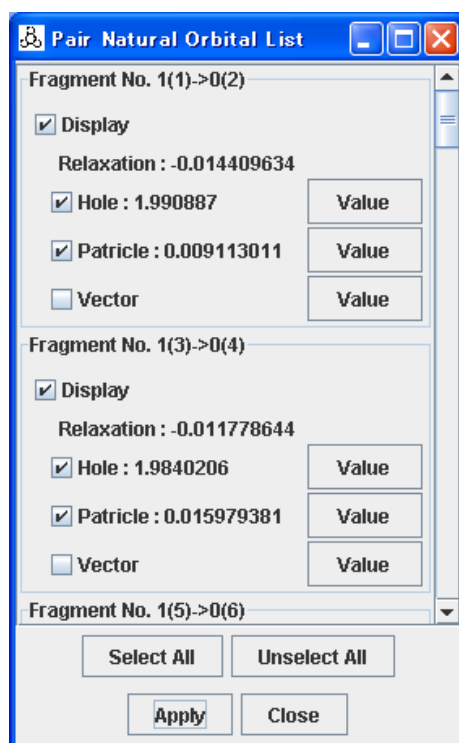


図 2.10 Pno(Pair Natural Orbital)グリッドファイル指定画面

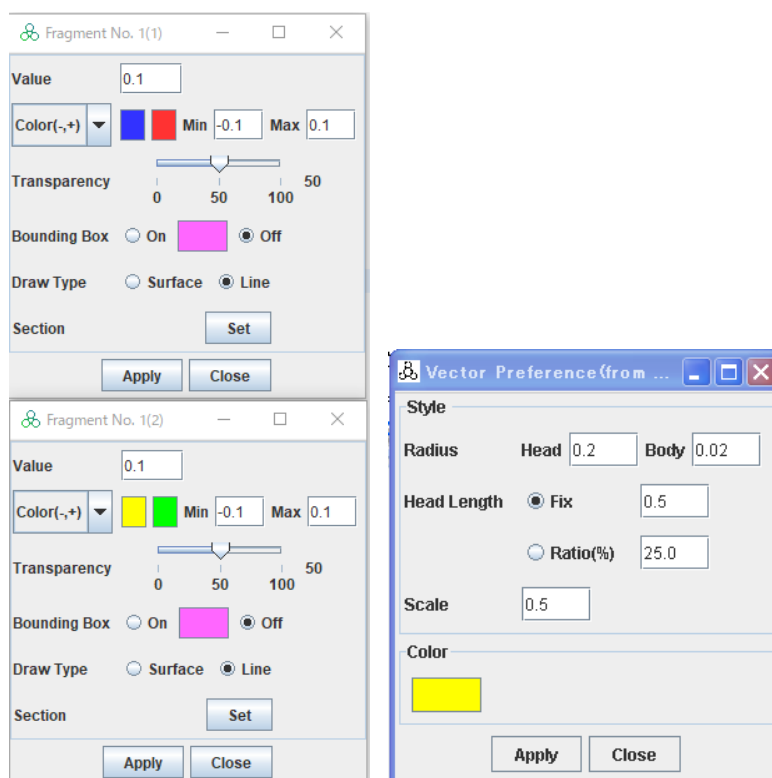


図 2.11 Hole, Particle, Vector 指定画面

◆ **Open File[difference density]** グリッドファイルの差分表示

複数のグリッドファイルを読み込みその係数を指定し、各グリッドの点の値を計算し等値面を表示します。グリッドの大きさ個数が異なるファイルを指定した場合はエラーになります。図 2.12 に指定画面を示します。ファイルは 7 つまで指定可能です。

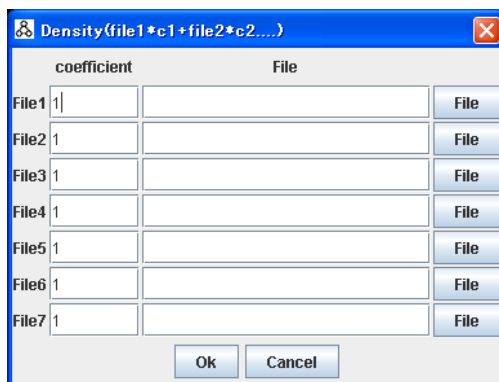


図 2.12 グリッドファイルの差分指定画面

◆ **Open File[difference cpf]** チェックポイントファイルの差分表示

複数のチェックポイントファイルを読み込みその係数を指定し、電荷、フラグメント相互作用エネルギーの値を計算し表示します。ファイル読み込み後 Tool->IFIE MAP を選択すると計算された値の MAP を表示します。図 2.13 に指定画面を示します。ファイルは 7 つまで指定可能です。ただし、原子数が異なる場合は、電荷の計算が、フラグメント数が異なる場合は、IFIE の値が計算されません。

Adjust Atom range は、そのファイルの1部の原子を適用したい場合に指定します。形式は、

開始原子番号 – 終了原子番号 File の対応する原子番号

です。たとえば、File 2 で “10 – 20 5” と指定すると、File1 の 10-20 の原子の値が、File2 の 5-15 に適用します。何も指定しない場合は、すべての原子に適用します。フラグメント相互作用エネルギーの値は、指定された原子のフラグメントが適用されます。

Coordinate は、“apply”がチェックされると、そのファイルの原子の座標が表示に使用されます。

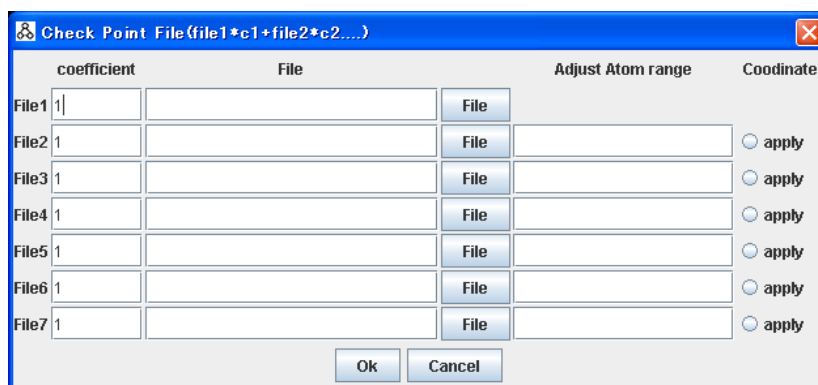


図 2.13 チェックポイントファイルの差分指定画面

◆ **OpenFile[Supermolecule]** 超分子計算

コンプレックス、タンパク質、リガンドの CPF を指定します。図 2.14 に指定画面を示します。コンプレックス中のタンパク質のフラグメント番号を“1-100”のように指定します。OK をクリックすると、指定されたファイルを読み込み、リガンド結合による電子緩和の効果を取り込んだ、フラグメント単位のタンパク質—リガンド IFIE 解析の値が、3D 表示、リスト表示、MAP 表示で表示されます。

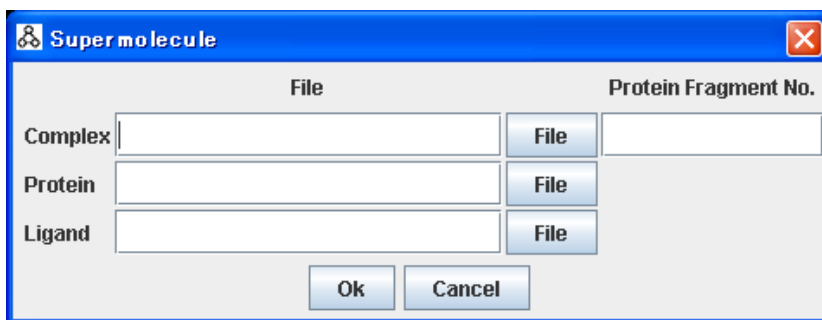


図 2.14 超分子計算ファイル指定画面

◆ **Save File** ファイルの格納

拡張子を選択することにより各種ファイル出力が可能です。

- 1) *pdb*, *ent* 表示されている分子構造を PDB ファイルの形式で格納します。格納されたファイル中の原子番号は振りなおされます。
- 2) *gjf* Gaussian の入力ファイルを出力します。出力例を以下に示します。ABINIT-MP Check Point File を表示している場合は、分子電荷、スピン多重度は以下の式で計算されます。

分子電荷 = 核荷電の和(原子番号の和) - フラグメントの電子数の和

スピン多重度 = 電子状態の1文字目が S の場合は1、Dの場合は2、Tの場合は3。

```
%chk=test.chk
#HF/6-31G(d,p) POPT=(MaxCycle=100) SCF=TIGHT

0 1
N 0 x001 y001 z001
C 0 x002 y002 z002
C 0 x003 y003 z003
.....
H 0 x071 y071 z071
O 0 x072 y072 z072
H 0 x073 y073 z073
Variables:
x001= 0.162000
y001= -0.202000
z001= 0.000000
x002= 1.612000
```

```

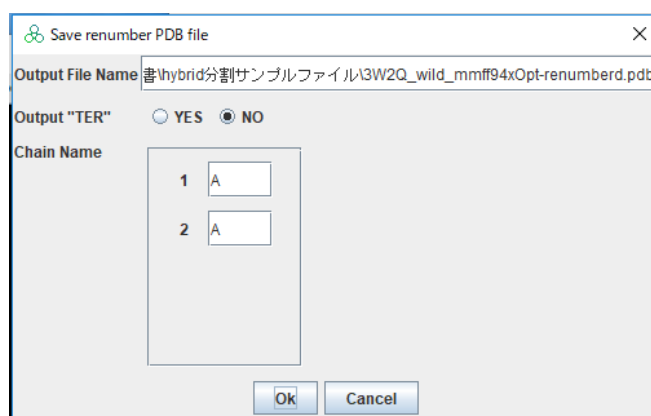
.....
z072= -5.671000
x073= -4.846000
y073= 12.697000
z073= -6.024000
Constants:

```

- 3) *jpg* 表示を JPEG ファイルに出力します。
- 4) *png* 表示を PNG ファイルに出力します。
- 5) *tif* 表示を Tiff ファイルに出力します。
- 6) *XYZ XYZ* 形式のファイルを出力します。*XYZ* 形式とは、初めに原子数、コメント、その後原子数分1行に原子記号、x座標、y座標、z座標が記述された形式です。
- 7) *prof* 表示属性ファイル :BioStation Viewer の表示属性(構造ファイル(pdb,cpf)、色、モード等を記述。

#### ◆ Save Renumbered PDB File

分子構造の原子番号を1からリナンバリングして、PDB 形式で格納する。ファイル名は xxx-renumbered.pdb(xxx は元のファイル名)が設定される。チェーン終端の”TER”出力の有無出力するチェーン名を指定する。



#### ◆ Edit ABINIT-MP File ABINIT-MP 入力ファイルの編集

ABINIT-MP 入力ファイルの編集画面が表示されます。ここで、パラメータを設定してファイルの格納、読み込みができます。入力指定は 2.8 節に示します。

#### ◆ Edit Gaussian Input File Gaussian の入力ファイルの編集

Gaussian 入力ファイルの簡易編集画面が表示されます。ここで、パラメータを設定してファイルの格納、読み込みができます。

#### ◆ Edit cpf2den Input File cpf2den の入力ファイルの編集

cpf2den 入力ファイルの簡易編集画面(図 2.15)が表示されます。ここで、パラメータを設定してファイルの格納、読み込みができます。チェックポイントファイルを読み込み表示している場合は、Check Point File の欄にそのファイル名が表示され、Domain computing lattice point の Min,Max にそのファイルに記述されている原子の座標の

xyz の最大値、最小値に  $\pm 2 \text{ \AA}$  加えた値が表示されます。cpf2den の詳細は「ABINIT-MP 利用マニュアル」を参照してください。

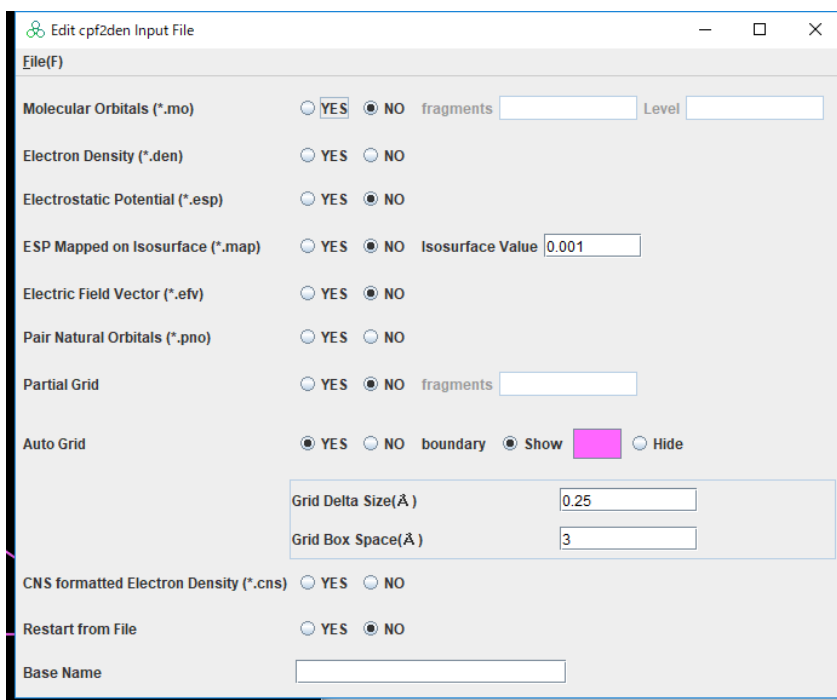
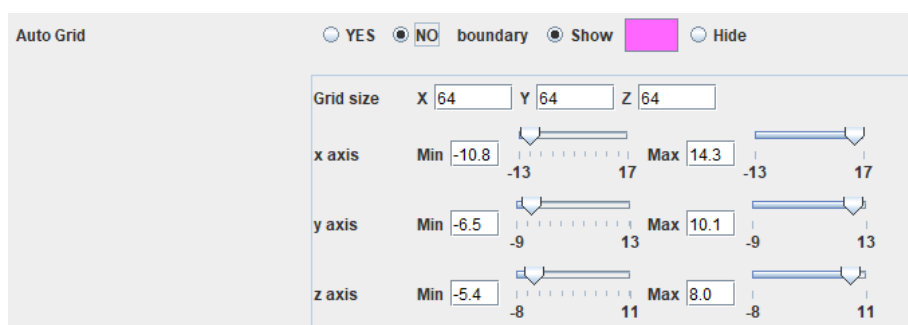


図 2.15 cpf2den 入力ファイル編集ウインドウ

- **Molecular Orbitals(\*.mo)**  
 fragments で指定されたフラグメントの分子軌道 (Molecular Orbital) のグリッドデータをファイルに出力するかどうかを指定します。  
 fragments: 分子軌道のグリッドデータを出力するフラグメントをフラグメント番号で指定します。例: '1,2,8-12'  
 Level: 出力される MO の範囲を指定します。以下に示す方法がある。
  - HOMO-LUMO 周辺の軌道を指定: 'Homo-5:Lumo+5' など。
  - 全ての軌道を指定: 'All'
  - 全ての占有軌道を指定: 'Occ'
  - 全ての非占有軌道を指定: 'Virtual'
  - 軌道の番号を直接指定: '1-10' など。
- **Electron Density File(\*.den)**  
 電子密度 (Electron density) のグリッドデータをファイルに出力するかどうかを指定します。
- **Electrostatic Potential File(\*.esp)**  
 静電ポテンシャル (Electrostatic potential) のグリッドデータをファイルに出力するかどうかを指定します。

- **Esp Mapped on Isurface(\*.map)**  
等電子密度面上の静電ポテンシャルのグリッドデータをファイルに出力するかどうかを指定します。Isosurface Value:等値面の値を指定します。
- **Electronic Field Vector File(\*.efv)**  
等電子密度面上の電場ベクトルのグリッドデータをファイルに出力するかどうかを指定します。
- **Pair Natural Orbitals(\*.pno)**  
Pno ファイルを出力するかどうかを指定します。
- **Partial Grid**  
分子の部分構造に対するグリッドデータを計算するかどうかを指定します。NO のままだと分子全体に対するグリッドデータを計算します。  
**Region** : グリッドデータの計算対象となる部分構造をフラグメント番号で指定します。例:'1,2,8-12'
- **Auto Grid**  
YES の場合は、グリッドデータを計算するボックスのサイズを **Grid Delta Size** と **Grid Box Space** の値を基に自動で設定します。  
**Boundary how/Hide** : 格子領域の表示有無を指定します。  
**Grid Delta Size** : グリッドデータのメッシュの細かさを Å 単位で指定します。  
**Grid Box Space** : グリッドデータを計算するボックスのサイズに関する指定。ボックスは分子の大きさに合わせて自動的に計算され、**GridBoxSpace** では分子の端とボックスの最短距離を Å 単位で指定します。リターンキーを押すと指定された値でボックスを再描画します。  
NO の場合は、x、y、zのグリッド数、開始点、終了点を指定します。指定画面を次に示します。



- **CNS formatted Electron Dnty(\*.cns)**  
CNS ファイルを出力するかどうかを指定します。Yes の場合は、グリッド指定を行います。
- **Restart from file**  
リスタートファイルから指定するかどうかを指定します。Yes の場合は、必要な情報



を指定します。

➤ **Base Name**

出力されるグリッドデータファイルのベースネームを指定します。指定されない場合は、読み込んだ CPF ファイルのベースネームを基に決定されます。

◆ **Molda Molda** の起動

Molda を起動します。Molda の使用方法は、Molda のマニュアルを参照してください。

◆ **Molda(with file)** Molda の起動

現在表示しているファイルを入力として、Molda を起動します。

◆ **File List** 読み込んだファイルリストを表示

複数のファイルを読み込んだ場合に表示する項目を選択します。指定画面を図 2.16 に示します。ABINIT-MP Grid File の場合は Value ボタンをクリックすると、図 2.5、図 2.7、図 2.8 または図 2.9 の指定画面が表示され、表示指定を変更できます。

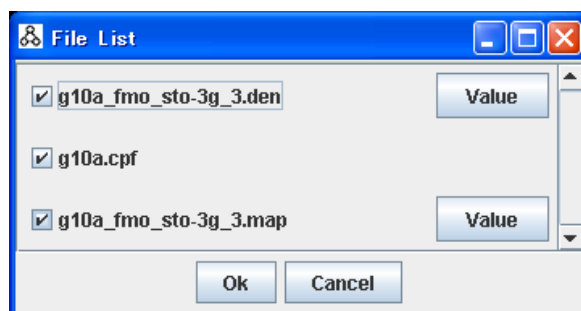


図 2.16 ファイルリストの表示画面

◆ **Close File** 読み込んだファイルの削除

読み込んだファイルを Viewer 上から削除します。チェックボックスをチェックして”Ok”ボタンをクリックすると削除されます。指定画面を図 2.17 に示します。

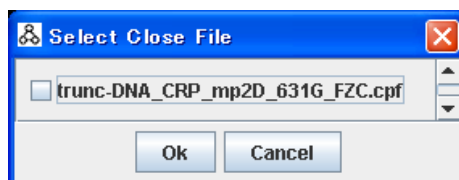


図 2.17 削除ファイルリストの表示画面

◆ **Exit** 終了します。

## 2.2.2 Viewpoint 視点操作

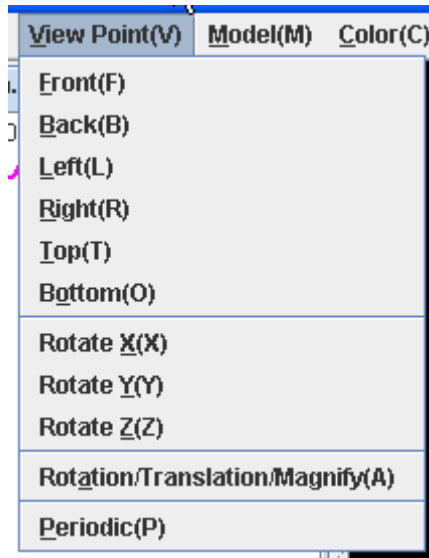


図 2.18 Viewpoint メニュー

視点を決められた位置へ移動します。表示の座標系は図 2.19 のようになっています。

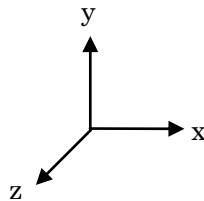


図 2.19 表示の座標系

- ◆ Front: 正面(z 軸のプラス方向から)
- ◆ Back: 後(z 軸のマイナス方向から)
- ◆ Left: 左側(x 軸のマイナス方向から)
- ◆ Right: 右側(x 軸のプラス方向から)
- ◆ Top 上(y 軸のプラス方向から)
- ◆ Bottom: 下(y 軸のマイナス方向から)
- ◆ Rotate X:X 軸を中心に回転します。
- ◆ Rotate Y:Y 軸を中心に回転します。
- ◆ Rotate Z:Z 軸を中心に回転します。
- ◆ Rotation/Translation/Magnify

視点位置をテキストで指定する機能。指定画面を図 2.20 に示し、表示指定を次に説明

します。“Apply”ボタンをクリックすることにより視点が移動します。

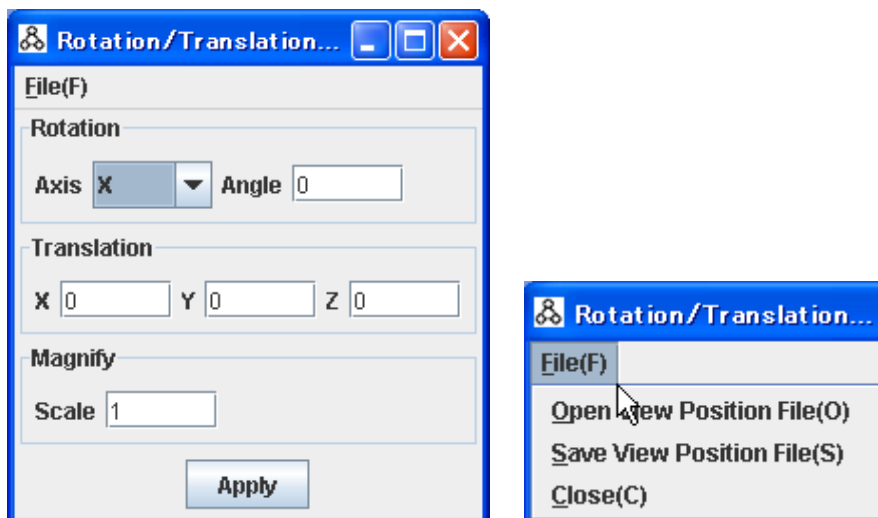


図 2.20 視点位置指定画面とそのファイルメニュー

- File メニュー 視点位置をファイルから読み込み、格納します。拡張子は\*.pos です。
    - Open ViewPosition File 視点位置をファイルから読み込みます。
    - Save ViewPosition File 視点位置をファイルへ格納します。
  - Rotation 回転の指定します
    - Axis 回転軸を指定します
    - Angle 回転角を指定します
  - Translation 移動指定します
    - X,Y,Z x,y,z それぞれの移動距離を指定します
  - Magnify 拡大縮小を指定します
    - Scale 拡大縮小率を指定します
- ◆ Periodic 周期表示機能 X,Y,Z 方向に指定された個数だけ同じものを表示します。指定画面を図 2.21 に示し、表示指定を次に説明します。

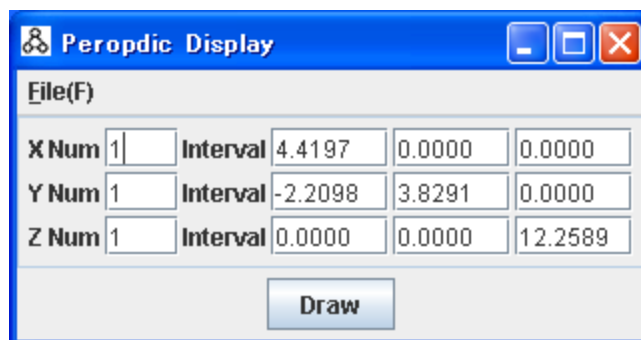


図 2.21 周期表示指定画面 (Gaussian Cube ファイルの例)

- File メニュー
  - Reset  
初期状態に戻します。
  - Close  
画面を閉じます。
- X, Y, Z  
Num に X, Y, Z 方向の表示数を指定します。Interval は表示間隔を指定します。Gaussian Cube ファイルを読み込んだ場合は、3 つの値を指定します。
- Draw  
指定された周期で表示します。分子構造の表示形式を変更した場合はこのボタンをクリックすることにより表示が切り替わります。等値面、断面を変更した場合は一度単一で表示してから、このボタンをクリックすることにより表示が切り替わります。

### 2.2.3 Model 表示形式指定

表示形式は、Atom/Structure の2種類選択可能です。それぞれ同時に表示可能です。Atom の場合に水素の表示形式を指定できます。

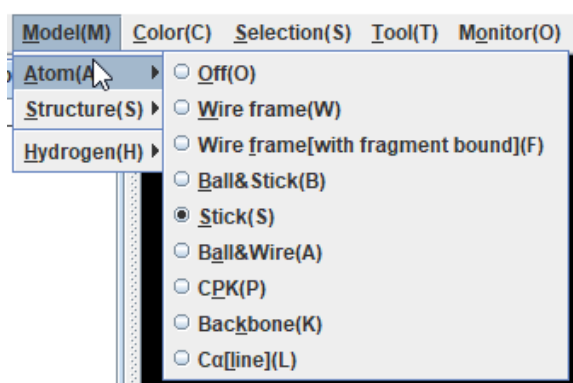


図 2.22 Model(Atom)メニュー

- 1) Atom の表示形式を指定します。
  - ◆ **Off** 非表示にします。
  - ◆ **Wire frame** ワイヤフレーム形式で表示します。
  - ◆ **Wire frame(with fragment bound)** ワイヤフレーム形式で表示します。フラグメントの境界が分かるように C $\alpha$  に球を表示します。
  - ◆ **Ball&Stick** ボールアンドスティック形式で表示します
  - ◆ **Stick** スティック形式で表示します。
  - ◆ **Ball&Wire** ボールアンドワイヤー形式で表示します。

- ◆ **CPK** 空間充填モデル形式で表示します。
  - ◆ **Backbone** 主鎖をチューブ形式で表示します。
  - ◆ **C $\alpha$  [line]** C $\alpha$ を spline 補間して線で結んで表示します。
- これらの表示例は 3.1.1 項に示します。

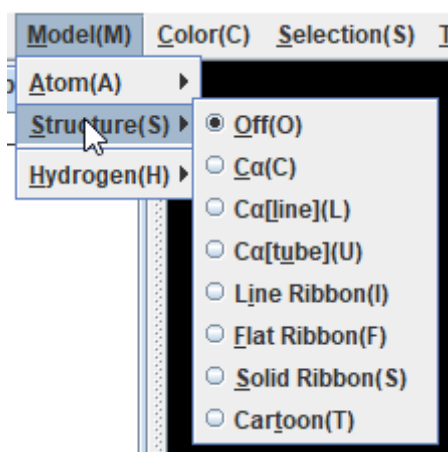


図 2.23 Model(Structure)メニュー

2) Structure の表示形式を指定します。

- ◆ **Off** 非表示にします。
- ◆ **C $\alpha$**  C $\alpha$ を直線で結んで表示します。
- ◆ **C $\alpha$  [line]** C $\alpha$ を spline 補間して線で結んで表示します。
- ◆ **C $\alpha$  [tube]** C $\alpha$ を spline 補間してチューブ形式で結んで表示します。
- ◆ **Line Ribbon** Ribbon(line)形式で表示します。
- ◆ **Flat Ribbon** Ribbon(Flat)形式で表示します。
- ◆ **Solid Ribbon** Ribbon(Solid)形式で表示します。
- ◆ **Cartoon** Cartoon 形式で表示します。

ERE\_EST.cpf の表示例を図 2.24ー図 2.30 に示します。

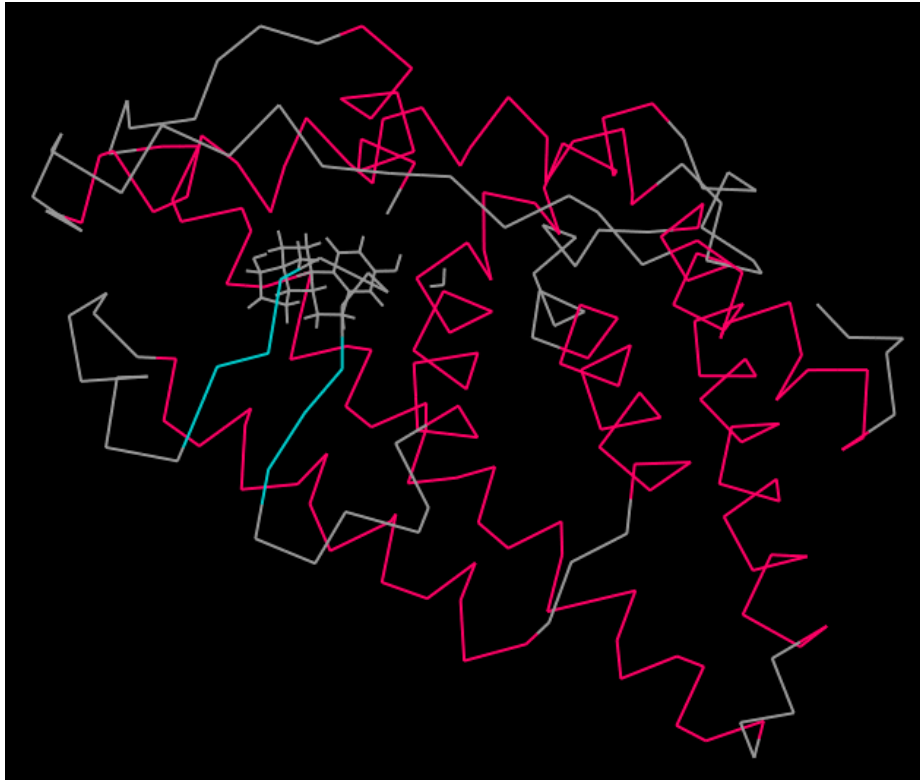


図 2.24 C $\alpha$ の表示例

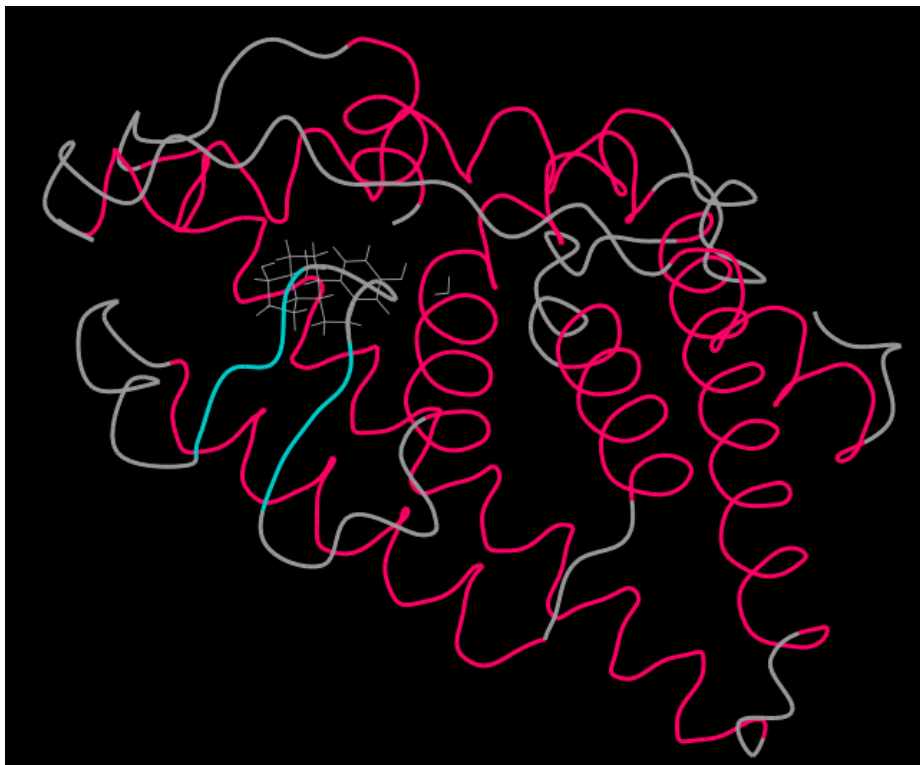


図 2.25 C $\alpha$  Lineの表示例



図 2.26  $C\alpha$  Tube の表示例



図 2.27 Line Ribbon の表示例



図 2.28 Flat Ribbon の表示例

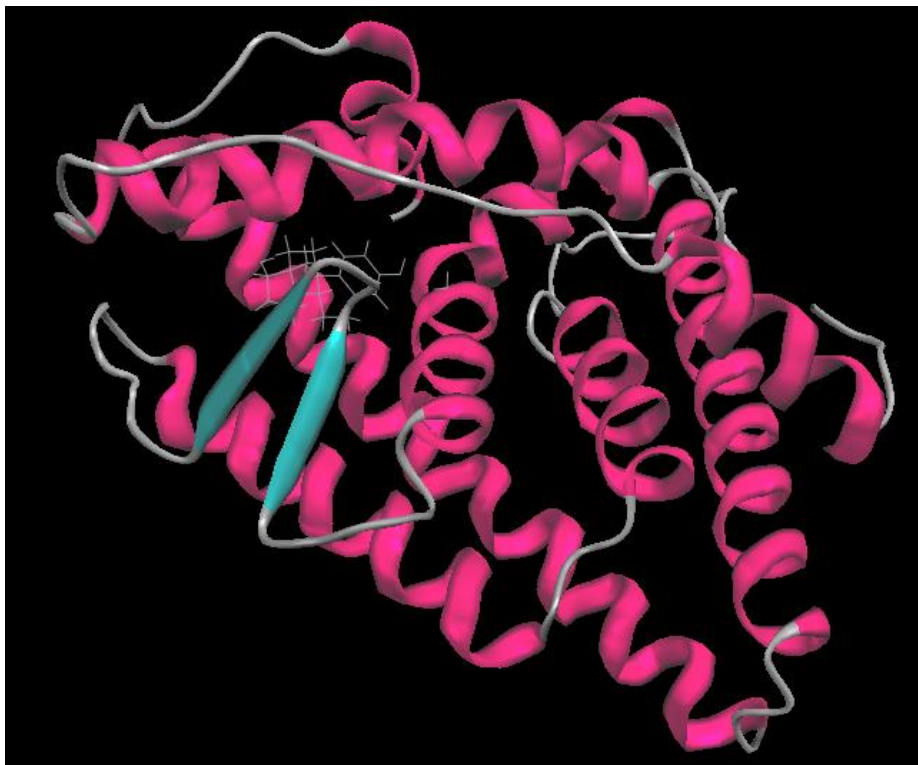


図 2.29 Solid Ribbon の表示例



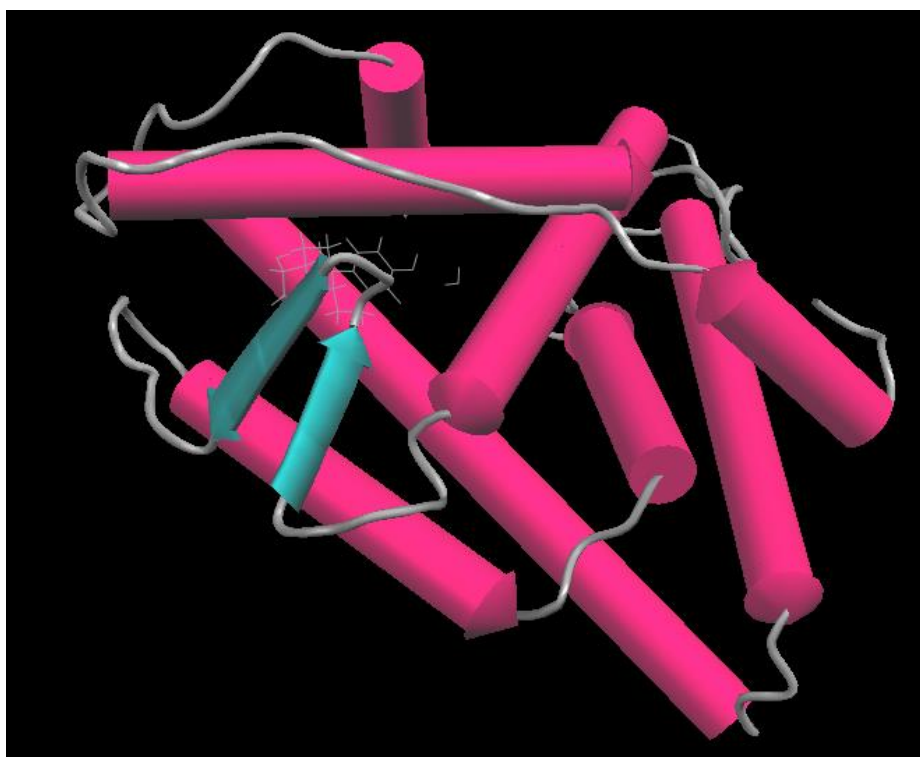
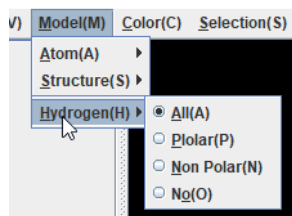


図 2.30 Cartoon 表示例

### 3) 水素の表示形式



- ◆ **All** 表示します。
- ◆ **Polar** N に接続している水素を表示します。
- ◆ **Non Polar** N 以外に接続している水素を表示します。
- ◆ **No** 非表示にします。

## 2.2.4 Color 色指定

Atom/Structure それぞれの表示色を指定します。Atom/Structure の指定項目は同じです。デフォルトは Atom:Atom、Structure:Structure です。

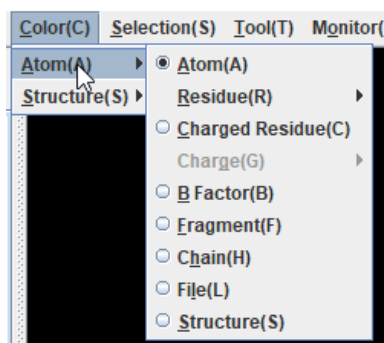


図 2.31 Color メニュー

- ◆ **Atom** 原子の種類で色付けします。
- ◆ **Residue** 残基で色付けします。
  - **Name** 残基の種類、DNA の場合は ATGC で色付けします。
  - **Hydrophilic/Hydrophobic** 親水性(■)、疎水性(■)で色付けします。
  - **Hydrophilic/Hydrophobic/Surface** 親水性(■)、疎水性(■)、分子表面(□)で色付けします。親水性、疎水性は分子表面以外の場合に色付けされます。
  - **Function** 機能で色付けされます。

機能	色	対象アミノ酸
酸性	■	アスパラギン酸、グルタミン酸
塩基性	■	アルギニン、リジン、ヒスチジン
中性	■	セリン、トレオニン、アスパラギン、グルタミン
脂肪族性	■	グリシン、アラニン、バリン、イソロイシン、ロイシン、メチオニン
芳香族性	■	フェニルアラニン、チロシン、トリプトファン
チオール基	■	システイン
イミノ基	■	プロリン

- **Select Residue** 指定画面で選択された残基のみ色付けして表示し他は白で表示します
- ◆ **Charged Residue** 残基の電荷の値で色付けします。(+: ■ 0: □ -: ■)
- ◆ **Charge** 表示指定のウィンドウが表示され、その指定に従い表示されます。チェックポイントファイルが Version2 以降の場合値は、HF, MP2, HF NBO, MP2 NBO から選択できます。色付けする値の範囲を指定でいきます。また、色付けは、赤→白→青、青→白→赤のどちらかを選択できます。電荷の指定がない場合は原子の種類で色付けします。表示形式が C $\alpha$  の場合は、その元となる原子の値で表示します。
  - **Atom** 原子の電荷の値で色付けします。

- **B Factor** 温度因子の値で色付けします。色付け範囲の最大値、最小値を指定します。

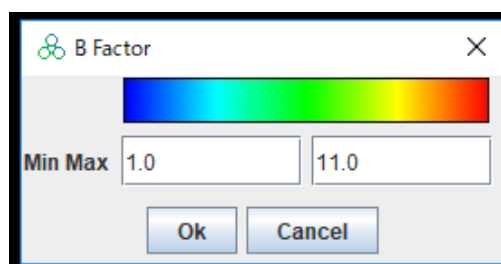


図 2.32 温度因子表示指定ウインドウ

- **Fragment** フラグメントの電荷の値で色付けします。
- **Residue** 残基単位の電荷の値で色付けします。

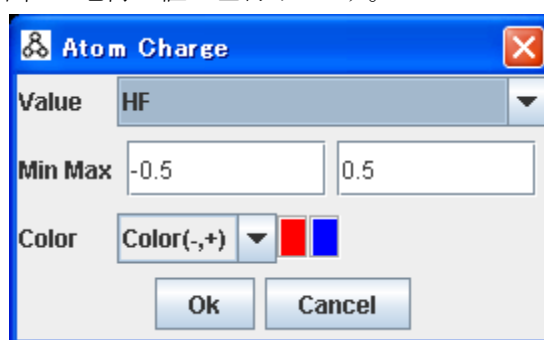





図 2.33 電荷表示指定ウインドウ

- ◆ **Fragment** フラグメントで色付けします。以下の 8 色でサイクリックに色付けします。  

- ◆ **Chain** チェーンごとに色付けします。以下の 8 色でサイクリックに色付けします。  

- ◆ **File** ファイルごとに色付けします。以下の 8 色でサイクリックに色付けします。  

- ◆ **Structure** 2 次構造の属性で、 $\alpha$  ヘリックス、 $\beta$  シート、その他で色付けします。

## 2.2.5 Selection 選択指定

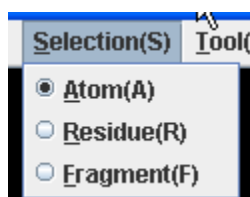


図 2.34 Selection メニュー

表示画面上をクリックして対象とする場合の選択対象を指定します。

- ◆ **Atom** 原子を対象とします。
- ◆ **Residue** 残基を対象とします。
- ◆ **Fragment** フラグメントを対象とします。

## 2.2.6 Tool ツール機能

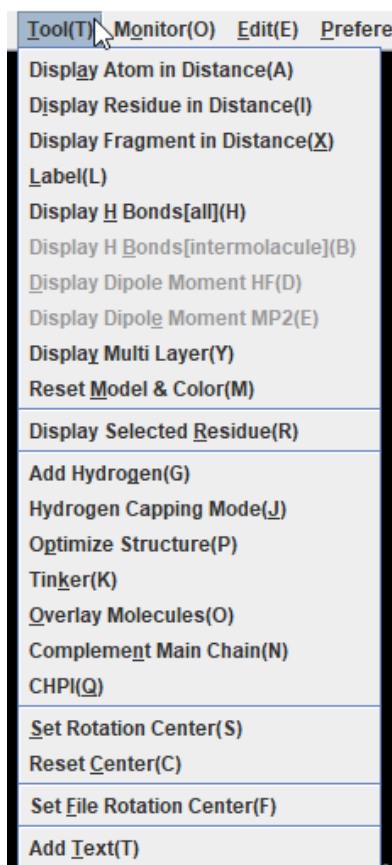


図 2.35 Tool メニュー

- ◆ **Display Atom in Distance** 指定した原子、残基またはフラグメントからの距離内の原子を表示します。このメニューを選択する前に対象をクリックしておき、図 2.36 に示す画面で距離を指定します。From selected では基準となるものが原子か、残基かを指定します。Display List では表示された原子のリスト表示指定を行います。表示されたリストの例を図 2.37 に示します。原子のリスト表示では、File メニューの Save で表示内容をテキストファイルに格納することが可能です。Distance で距離を指定します。

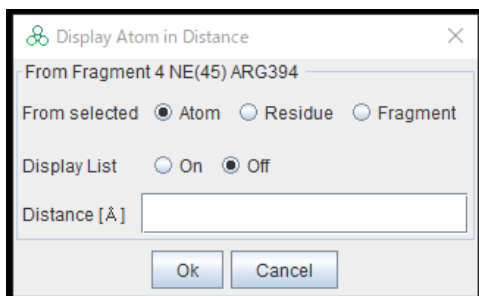


図 2.36 原子距離内表示の指定画面

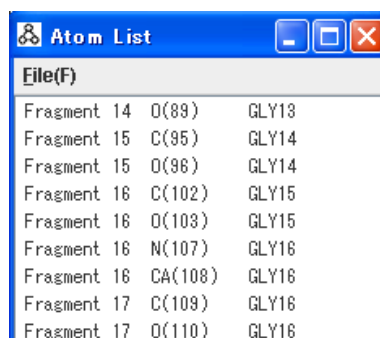


図 2.37 距離の指定リスト表示画面

- ◆ **Display Residue in Distance** 指定した原子、残基またはフラグメントからの距離内の残基を表示します。残基は、構成する原子がひとつでも距離内にある場合にに表示されます。このメニューを選択する前に対象をクリックしておき、図 2.38 に示す画面で距離を指定します。From selected では基準となるものが原子か、残基かを指定します。Display List では表示された原子のリスト表示指定を行います。原子のリスト表示では、File メニューの Save で表示内容をテキストファイルに格納することが可能です。Distance では距離を指定します。

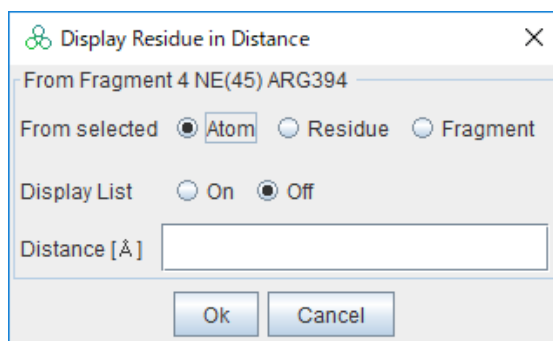


図 2.38 残基距離内表示の指定画面

- ◆ **Display Fragment in Distance** 指定した原子、残基またはフラグメントからの距離内のフラグメントを表示します。フラグメントは、構成する原子がひとつでも距離内にある場合にに表示されます。このメニューを選択する前に対象をクリックしておき、図 2.39 に示す画面で距離を指定します。From selected では基準となるものが原子か、残基かを指定します。Display List では表示された原子のリスト表示指定を行います。原子のリスト表示では、File メニューの Save で表示内容をテキストファイルに格納することが可能です。Distance では距離を指定します。

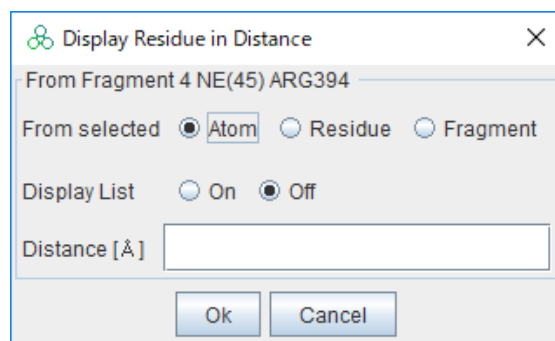


図 2.39 フラグメント距離内表示の指定画面

- ◆ **Label** 全体の残基、原子、フラグメントのラベル表示を指定します。指定画面を図 2.40 に示します。

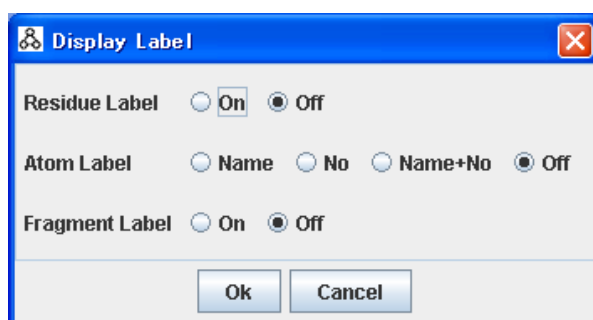


図 2.40 ラベル表示指定画面

- ◆ **Display H Bonds[all]** すべての水素結合を表示します。もう一度選択すると表示が消えます。
- ◆ **Display H Bonds[intermolecule]** 分子間の水素結合を表示します。もう一度選択すると表示が消えます。
- ◆ **Display Dipole moment HF** フラグメントごとの HF の Dipole moment の値を矢印で表示します。表示指定は、Preference(2.2.9)で指定可能です。もう一度選択すると表示が消えます。
- ◆ **Display Dipole moment MP2** フラグメントごとの MP2 の Dipole moment の値を矢印で表示します。表示指定は、Preference(2.2.9)で指定可能です。もう一度選択すると表示が消えます。MP2 は、チェックポイントファイル Ver.2 以上を読み込んだ場合に有効です。
- ◆ **Multi Layer**  
チェックポイントファイル Ver.3 以上で有効です。High Layer を Stick,、Middle Layer を Wire frame、Low Layer を C $\alpha$  Line で表示します。

- ◆ **Reset Model & Color** 表示モデル、色を初期状態に戻します。各残基、原子の指定がクリアされます。
- ◆ **Display Selected Residue** 指定した残基を表示します。残基ごとの表示指定画面を表示して、表示する残基を指定します。表示指定画面を図 2.41 に示します。Select All ボタンをクリックするとすべての残基が指定され、Unselect All ボタンをクリックするとすべての残基の選択が解除されます。



図 2.41 残基表示有無指定画面

- ◆ **Add Hydrogen** PDBファイルを対象として水素付加を行います。指定画面でオプション、入力ファイル、出力ファイルを指定します。指定画面を図 2.42 に示します。**Input File**には表示している PDB ファイル名が指定され、**Output File**には PDB ファイル名\_addH と初期表示されます。実行後結果と表示を入れ替えるかどうかの確認の画面(図 2.43)が表示されます。ここで、”OK”をクリックすると表示が入れ替わります。使用するプログラムは、Reduce、Babel、Bond Builder から選択します。Reduce,Babel,Bond Builder の設定は、それぞれ、7.5 節、7.6 節、7.7 節を参照してください。

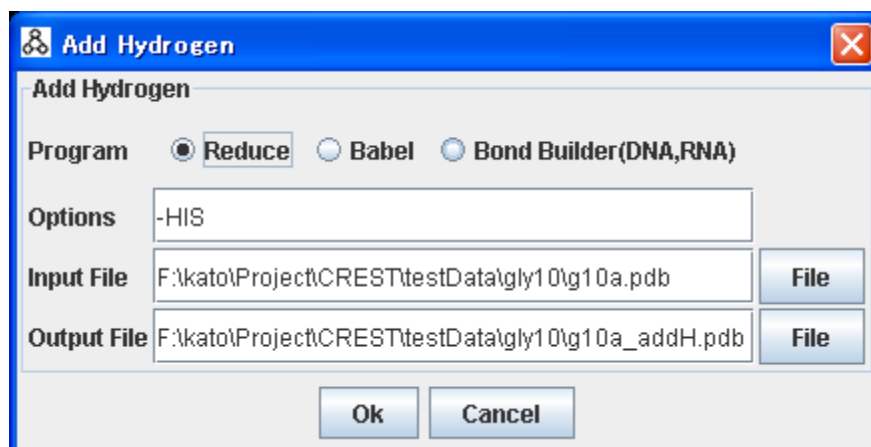


図 2.42 水素付加指定画面

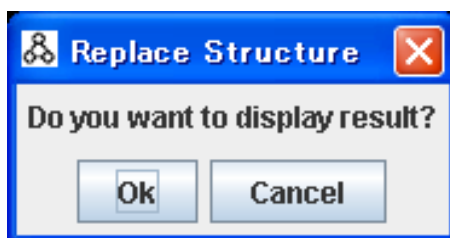


図 2.43 3D 表示入れ替えの指定

◆ **Hydrogen Capping Mode**

末端処理を行います。Terminal では、末端の処理方法を選択します。Histidine では、HIS の水素の形式を選択します。

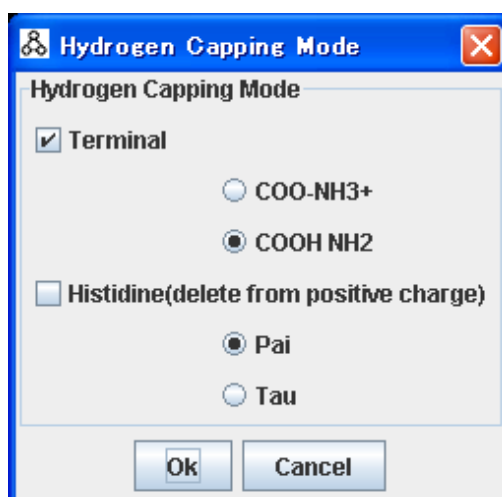


図 2.44 末端処理の指定



#### ◆ Optimize Structure

構造最適化を実行し表示します。**Hydrogen Option file** は、水素付加に関するオプションを記述したファイルを指定します。**Optimize Option file** は、構造最適化のオプションを記述したファイルを指定します。オプションは、5 章に詳細なマニュアルを記載しています。**”OK”**ボタンを押すと実行ウインドが表示され、途中結果が表示されます。終了後に実行後結果と表示を入れ替えるかどうかの確認の画面が表示されます。ここで、**”OK”**をクリックすると表示が入れ替わります。

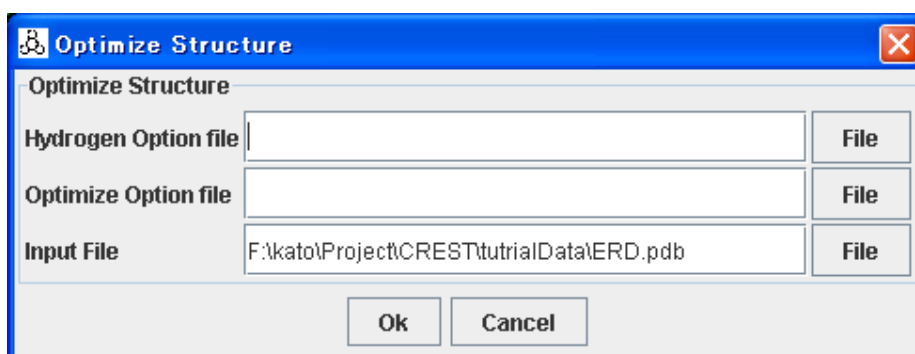


図 2.45 構造最適化の指定

#### ◆ TINKER

Tinker を起動して結果を表示します。Program では、使用するプログラムを指定します。Other の場合は、プログラム名をテキストで入力します。Options は、オプションパラメータを指定します。Input File は、入力の PDB ファイルを指定します。デフォルトとして、3D 表示されているファイル名が設定されます。Key File は、使用する Key File を指定します。Key File はあらかじめ編集し用意しておいてください。**”OK”**ボタンを押すと実行ウインドが表示され、途中結果が表示されます。終了後に実行後結果と表示を入れ替えるかどうかの確認の画面が表示されます。ここで、**”OK”**をクリックすると表示が入れ替わります。結果ファイル名は、入力ファイルが ABC.pdb の場合、ABC\_プログラム名.pdb になります。

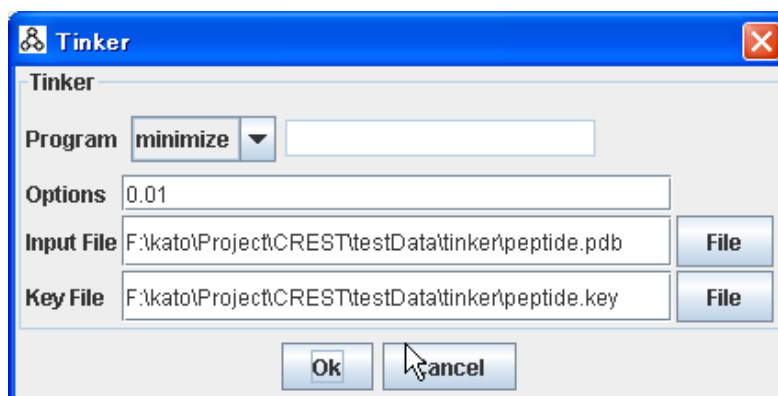


図 2.46 TINKER の指定

#### ◆ Overlay Molecules

重ねあわせを行います。図 2.47 の重ね合わせ画面が表示されます。

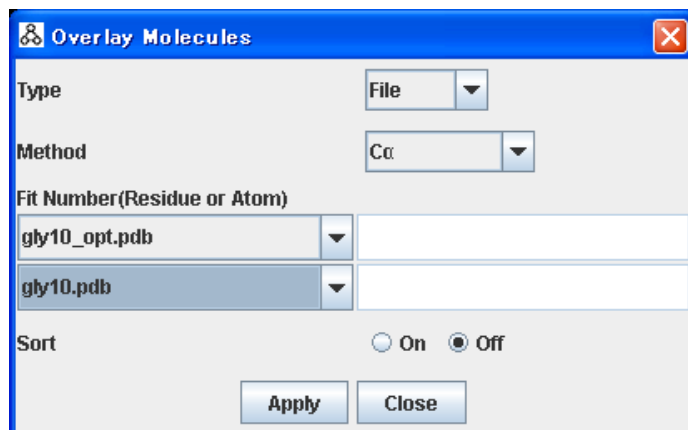


図 2.47 重ね合わせの指定画面

Type、Method、Fit Number(Residue or Atom)を指定します。

##### 1) Type

File、Residue、Atom があり、重ね合わせの対象を指定します。

##### 2) Method

C $\alpha$ 、Heavy Atoms、All Atoms があり、このメニューの選択により Type が File、Residue の場合はその中の対象原子を指定します。

##### 3) Fit Number(Residue or Atom)

対象とするファイルとそのファイル中の原子、残基の番号を指定します。番号は、対象とする残基、原子を分子構造表示、または、Tree 図よりクリックして選択することができます。キーボードによるテキスト入力も可能です。番号は連番の場合は”-”で入力し、連番でない場合は” ”で区切って入力します。

例 1 1 から 5 残基を対象とする場合 “1-5”

例 2 1,2,5, 残基を対象とする場合 “1,2,5”

一度選択された番号は削除されないので、取り消す場合はキーボードの Back Space または、Delete で削除してください。

入力された原子の数に過不足がある場合は少ないほうに合わされます。”Ok”ボタンをクリックすることにより、重ね合わせられた分子構造が表示されます。このときに、各ファイルの移動中心は重ね合わせに使用した原子全体の重心になります。選択した原子の RMSD をメッセージエリアに表示します。

##### 4) Sort

On/Off で、指定した原子番号をソートするかどうかを指定します。

- ◆ **Complement Main Chain** 主鎖の補完処理を行います。  
Start Residue NO.に補完する主鎖の番号を指定します。補完する主鎖の番号を指定しない場合は、欠損している部分を自動的に補完します。補完する主鎖の番号を指定する場合は、元の構造の端の残基を Tree 図上でクリックすることにより指定します。補完に使用するファイル名を指定し、”Apply”ボタンをクリックします。補完後のファイルは、Viewer 起動ディレクトリに元のファイル名(xxx)より、xxx\_complement.pdb として格納されます。

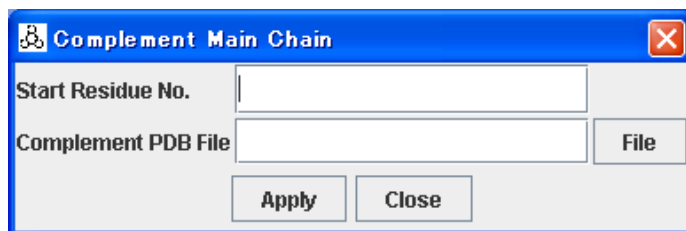


図 2.48 主鎖の補完の指定画面

- ◆ **CHPI** CHPI プログラムを起動し、結果を表示します。使用方法は 3.9 節に示します。
- ◆ **Set Rotation Center** 回転中心を設定します。選択されている原子を中心に表示が回転するようになります。
- ◆ **Reset Center** 回転中心をデフォルトの状態に戻します。
- ◆ **Set File Rotation Center** ファイルごとの重心に移動中心を設定します。
- ◆ **Add Text** 3D 表示上にテキストを表示します。このメニューを選択すると図 2.49 示すテキスト指定画面が表示されます。File メニューの Open File, Save File で指定されたテキストの入出力が可能です。

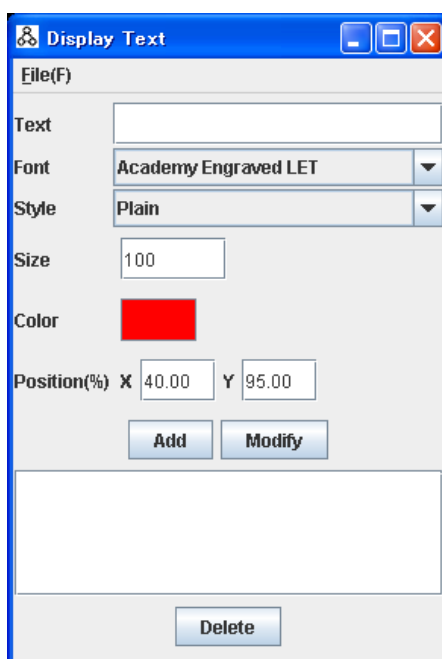


図 2.49 テキスト指定画面

- **Text** 表示するテキストを指定します。
- **Font** フォントを指定します。ただし、うまく表示されないものもあります。日本語を入力した場合は **MS xxx** のフォントを指定してください。
- **Style** Plane, Bold, Italic, Bold Italic を指定します。
- **Color** 色を指定します。
- **Position(%)** 表示位置を指定します。表示後、表示テキストをマウスの右ボタンを押しながら、位置の調節が可能です。マウスの位置は、テキストの左下ですが、若干ずれることがあります。
- **Add** 指定されたテキストを 3D 表示画面に表示します。表示されたテキストはボタン下のリストに追加され、リストを選択することにより、変更削除が可能です。
- **Modify** 表示形式を変更します。リストをクリックすることにより、そのテキストの表示属性が表示されます。ここで、必要な値の変更を行い、“Modify”ボタンをクリックすることによりその表示が変更されます。
- **Delete** リストで選択されているテキストを削除します。

## 2.2.7 Monitor モニター機能

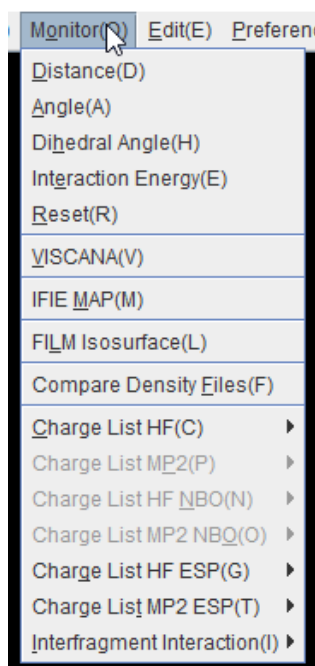


図 2.50 Monitor メニュー

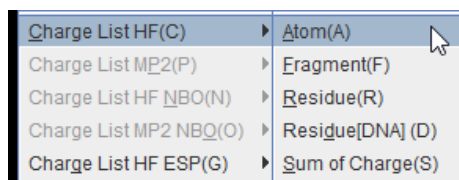
- ◆ **Distance** 原子間の距離を表示します。メニュー選択後原子を二つクリックするとその距離が表示されます。このモードの時はメニューが緑色になっています。もう一度同じ原子をクリックすると表示が消えます。
- ◆ **Angle** 角度を表示します。メニュー選択後原子を三つクリックするとその角度が表示されます。このモードの時はメニューが緑色になっています。もう一度同じ原子をクリックすると表示が消えます。
- ◆ **Dihedral Angle** 2面角を表示します。メニュー選択後原子を四つクリックするとその2面角が表示されます。このモードの時はメニューが緑色になっています。もう一度同じ原子をクリックすると表示が消えます。
- ◆ **Interaction Energy** 指定されたフラグメント間のフラグメント間相互作用エネルギーの値を表示します。メニュー選択後原子を二つクリックするとその2つのフラグメント間相互作用エネルギーの値が表示されます。このモードの時はメニューが緑色になっています。
- ◆ **Reset** Monitor 機能で指定された表示を消します。
- ◆ **VISCANA** あるタンパク質に対して、複数のリガンドを適用したときの、それぞれのケースの各フラグメントと対象フラグメントとの相互作用の値により、クラスター解析を行い、その結果を表示するものです。詳細は 2.5 節で説明します。
- ◆ **IFIE MAP**

IFIE MAP はフラグメント間の相互作用エネルギーの値を2次元の MAP で表示します。それぞれのフラグメント間の相互作用エネルギーの値で色づけされ、右、上に二次構造を色で指定します。表示は拡大縮小が可能で、マウスにより値に表示、3D表示との連携が可能です。詳細は 2.6 節で説明します。

◆ **FILM Isosurface LMP2** の計算結果の等値面表示を行います。詳細は 2.7 節で説明します。

◆ **Charge List (HF,MP2,HF NBO,MP2 NBO,HF ESP, MP2 ESP)**

HF, MP2, HF NBO, MP2 NBO, **HF ESP, MP2 ESP** の電荷の値をリスト表示します。MP2 は、チェックポイントファイル Ver.2 以上を読み込んだ場合に有効で、NBO はチェックポイントファイル Ver.3 以上を読み込んだ場合に有効です。表示例を図 2.51 に示します。File メニューより、リストをテキストファイルに出力することも可能です。



リストの種類

atom	residue	fragment	[au]
1	N	ASP1 (1)	-0.377923
2	H1	ASP1 (1)	0.318179
3	H2	ASP1 (1)	0.339849
4	H3	ASP1 (1)	0.355082
5	CA	ASP1 (1)	0.058643
6	HA	ASP1 (1)	0.103179
7	CB	ASP1 (1)	-0.152929
8	HB2	ASP1 (1)	0.078504
9	HB3	ASP1 (1)	0.065323
10	CG	ASP1 (1)	0.265330
11	OD1	ASP1 (1)	-0.447795
12	OD2	ASP1 (1)	-0.490557
13	C	ASP1 (2)	0.319230
14	O	ASP1 (2)	-0.292897
15	N	PRO2 (2)	-0.304193
16	CD	PRO2 (2)	-0.008019
17	HD2	PRO2 (2)	0.067833
18	HD3	PRO2 (2)	0.071095
19	CG	PRO2 (2)	-0.102656

(1) Atom

fragment	[au]
1	0.114887
2	0.087914
3	-0.022377
4	0.000685
5	-0.959355
6	-0.002878
7	0.043055
8	0.026185
9	-0.065267
10	-0.015329
11	-0.013637
12	-0.019600
13	-0.003957
14	0.026176
15	0.842399
16	-0.092279
17	0.021936
18	0.011504
19	0.842453

(2) Fragment

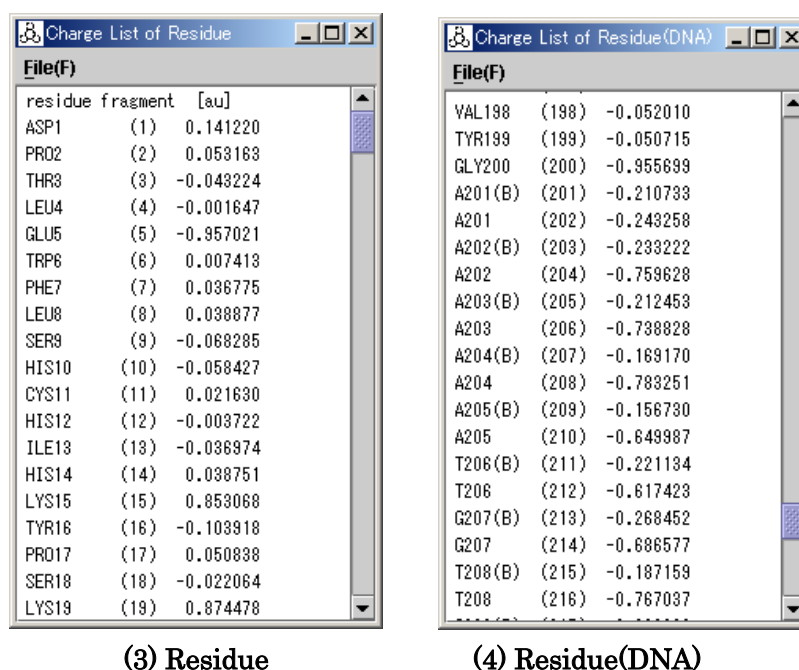


図 2.51 電荷リスト表示例

- **Atom** 原子ごとの電荷のリストを表示します。
- **Fragment** フラグメントごとの電荷のリストを表示します。
- **Residue** 残基ごとの電荷のリストを表示します。
- **Residue(DNA)** 残基ごとの電荷のリストを表示します。DNA の部分は塩基とそれ以外の部分の合計が表示されます。
- **Sum of Charge** 指定された範囲のフラグメント、残基、原子の電荷の合計を表示します。範囲指定の画面を図 2.52 に示します。結果は **Sum of Charge** のところに表示されます。

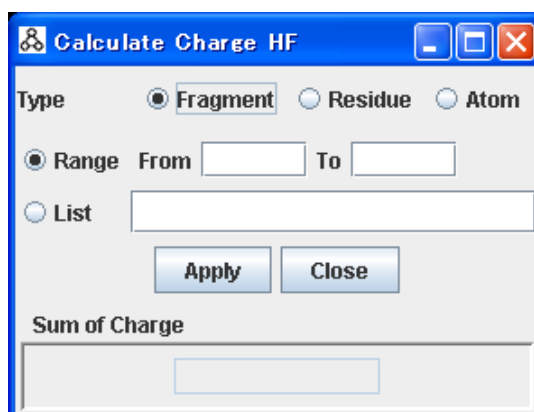


図 2.52 指定範囲の電荷表示画面

◆ **Intefragment Interaction** フラグメント間相互作用に関するオペレーション

- **1:1 1 対 1** のフラグメント間相互作用エネルギーの値でフラグメントを色付けします。このメニューを選択する前に基準となるフラグメントを選択しておいてください。基準としたフラグメントからのエネルギーの値で色付けします。このメニューを選択すると値の種別、色付けする値の範囲と閾値を指定する画面(図 2.53)が表示されます。CPF の Version により Value の選択項目が変わります。詳細は 2.6 節を参照ください。

**Many Body Calculation (Value:main+side chain)**

CPF の Version3 以降で有効です。多体の評価の表示指定です。この項目をチェックした場合、フラグメントが、主鎖、側鎖が別のフラグメントで分割されている場合に、残基単位で、主鎖+側鎖の値で色付けします。

**Color**

単位は kcal/mol です。デフォルトとして、ファイル全体の最小値、最大値が表示されています。変更すると、次にこのメニューを選択するまで、その範囲での色付けで表示されます。最小値、最大値を変更後、ファイル全体の最小値、最大値に戻すにはそれぞれ0を指定します。閾値を指定すると、エネルギーの値の絶対値が閾値以下のフラグメントは表示されなくなります。これにより、相互作用の小さいフラグメントの表示の抑制が可能です。このメニューを選択した場合は、分子構造をクリックすると、クリックされたフラグメントを基準とした色付けの表示がされます。

このメニュー選択前、フラグメントが選択されていない場合は、次に選択されたフラグメントを基準として表示します。

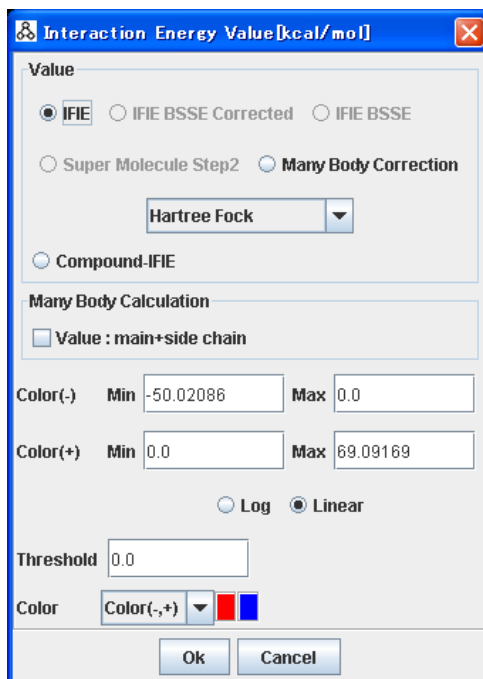


図 2.53 フラグメント間相互作用エネルギーの表示の指定画面



- **1:1(Lock)** フラグメント間相互作用エネルギーの値でフラグメントを色付けします。前述との違いは、分子構造をクリックした場合に基準のフラグメントは変化せず、クリックした原子の情報がメッセージエリアに表示される点です。表示はそのままにしておき、着目した原子の情報を得るのに使用します。このモードの場合は、残基、原子の選択は不可となり、表示属性の変更もできません。
- **N:1** 基準となるフラグメントを複数指定して指定されたフラグメント群とのフラグメント間相互作用エネルギーの値でフラグメントを色付けします。指定画面を図 2.54 に指定します。基準となるフラグメントは、3D 表示上でシフトを押しながらフラグメントを選択するとその間のフラグメントが選択されます。Tree 図上で選択、テキスト入力で指定することも可能です。複数のフラグメントを指定する場合は、”,”または”-”で連続する番号を指定してください。

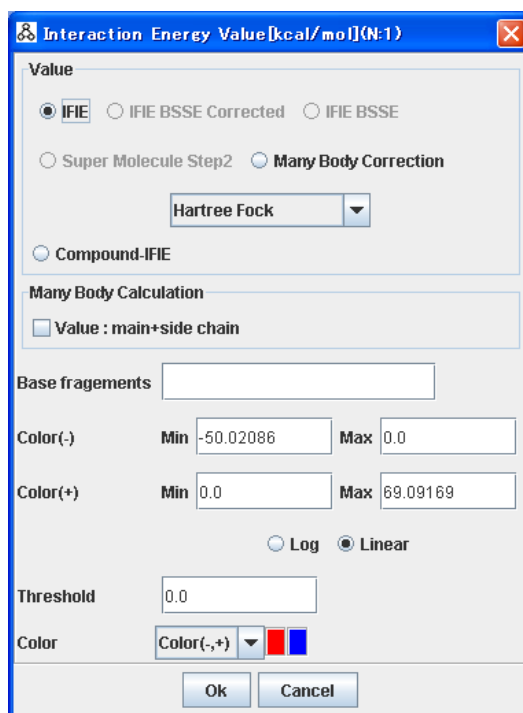


図 2.54 N:1 のフラグメント間相互作用エネルギー表示の指定画面

- **N:N** 基準となるフラグメントと対象とするフラグメント両方を複数指定して、その間のフラグメント間相互作用エネルギーの値をメッセージエリアに表示します。指定画面を図 2.55 に指定します。3D 表示、Tree 図より選択する場合は入力フィールド前の○をチェックしてください。チェックしてある入力フィールドに指定が反映されます。

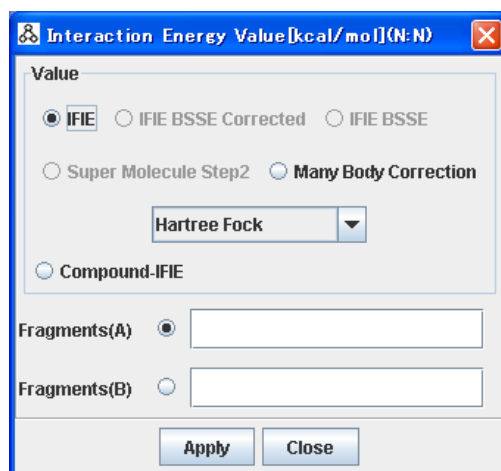


図 2.55 N:N のフラグメント間相互作用エネルギー表示の指定画面

- **List** リスト表示する値の種別を選択後、指定されたフラグメントと各フラグメント間の相互作用エネルギーの値をリスト表示します。この内容をファイルに格納することも可能です。ファイル格納は、メニューバーの **File**→**Save** を選択しファイル名を指定します。フラグメントが側鎖の場合には、残基名の表示に”\_s”が付加されます。図 2.56 に表示例を示します。

residue fragment		[kcal/mol]
ALA307	(1)	0.009575
LEU308	(1)	0.009575
SER309	(2)	0.000000
LEU310	(2)	0.000000
THR311	(3)	0.000000
ALA312	(3)	0.000000
ASP313	(4)	0.057450
GLN314	(4)	0.057450
MET315	(5)	0.000000
VAL316	(5)	0.000000
SER317	(6)	-0.009575
ALA318	(6)	-0.009575
LEU319	(7)	-0.019150

図 2.56 フラグメント間相互作用エネルギーのリスト表示の画面例

- **3 Body List** 多体項の計算値の三体項の値と、その構成フラグメント番号を表示します。表示されたリストをクリックすると、該当のフラグメントがハイライト表示されます。リスト表示は、エネルギー計算レベル、ソート対象、最大値、最小値を指定して、”**Apply**”ボタンをクリックするとその条件でリストが表示されます。表示例を図 2.57 に示します。

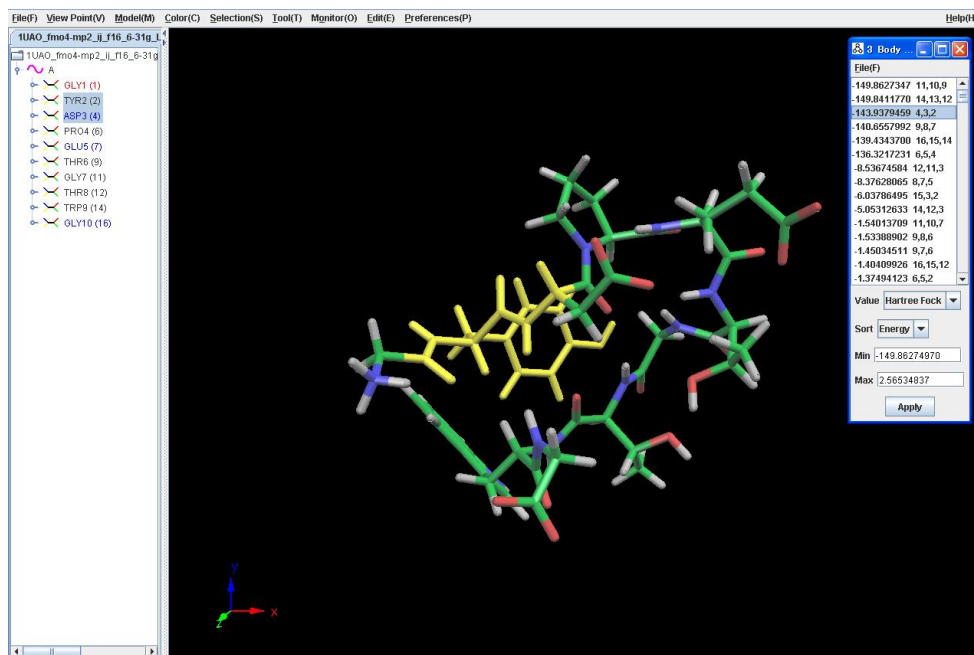


図 2.57 三体項の値リスト表示の画面例

- **4 Body List** 多体項の計算値の 4 体項の値と、その構成フラグメント番号を表示します。表示されたリストをクリックすると、該当のフラグメントがハイライト表示されます。リスト表示は、エネルギー計算レベル、ソート対象、最大値、最小値を指定して、“Apply”ボタンをクリックするとその条件でリストが表示されます。表示例を図 2.58 に示します。

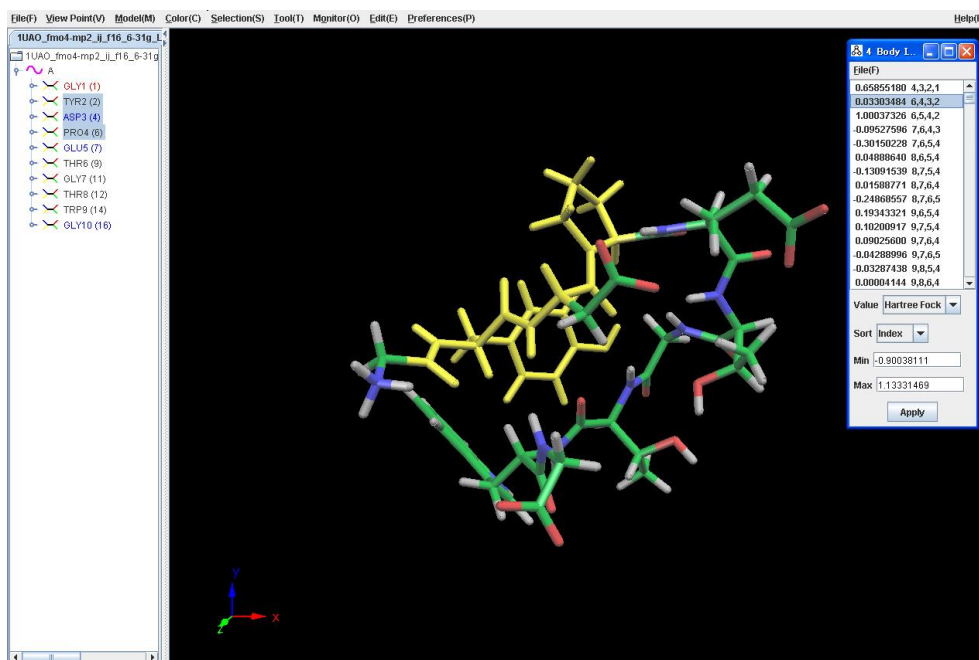


図 2.58 四体項の値リスト表示の画面例

1 対 1 のフラグメント間相互作用エネルギーの値でフラグメントを色付ける TripCage の例で、**Fragment Value:main+side chain** をチェックした場合としない場合の表示例を示します。この例では、フラグメントが、主鎖、側鎖で別に切られています。画面上部の SER20 が、図 2.59 では、それぞれのフラグメント値で表示されていますが、図 2.60 では、残基ごとに主鎖+側鎖の値で色付けされます。

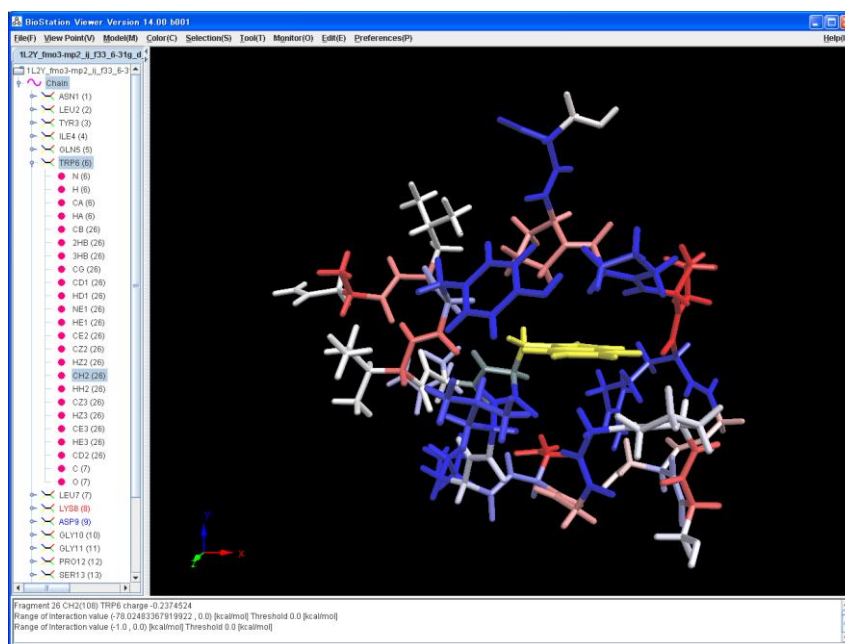


図 2.59 フラグメント間相互作用エネルギー フラグメントの値で色づけ

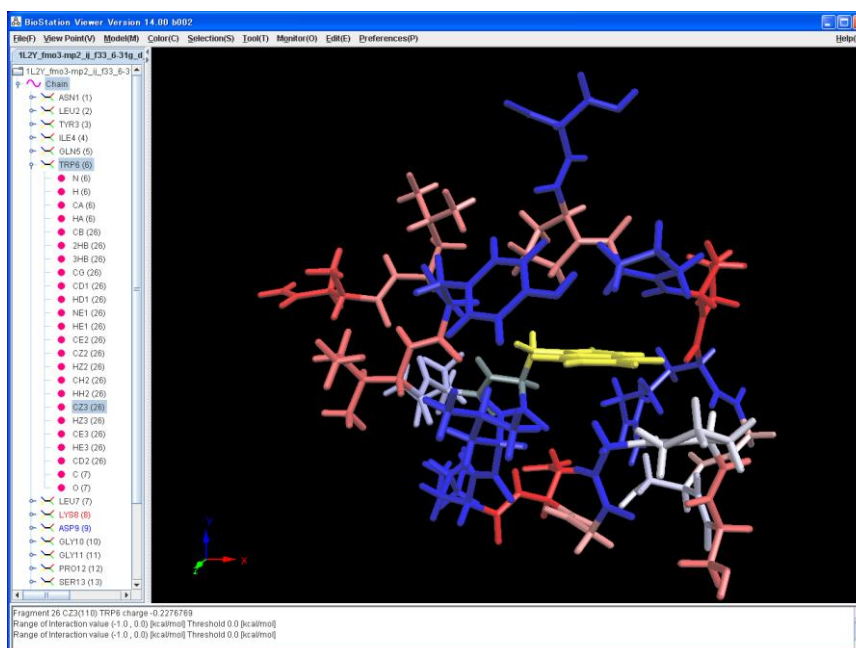


図 2.60 フラグメント間相互作用エネルギー 残基ごとに色づけ

## 2.2.8 Edit 編集機能

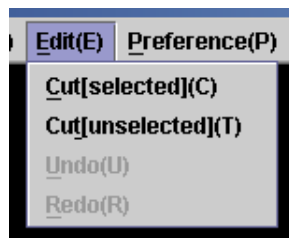


図 2.61 Edit メニュー

- ◆ **Cut(selected)** 選択されている対象を削除します。
- ◆ **Cut(unselected)** 選択されていない対象を削除します。
- ◆ **Undo** 削除を取り消します。
- ◆ **Redo** 削除を再実行します。

## 2.2.9 Preferences プリファレンス指定

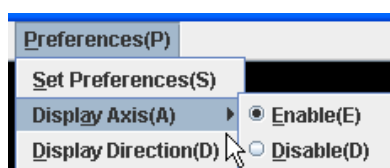


図 2.62 Preference メニュー

- ◆ **Set Preferences** 表示指定の画面を表示します。指定画面を図 2.63 に示します。タブにより指定項目を切り替えます。入力フィールドの右の値は推奨範囲です。解像度を上げると表示はきれいになりますが、表示時間、メモリを多く使用します。指定後”Apply”ボタンをクリックすると指定が反映されます。

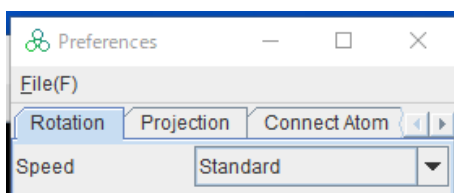


図 2.63 Preference 表示指定画面

### 1) ファイルメニュー

ファイルメニューの **Open, Save** でこの設定のファイルの読み込み、格納ができます。起動時にはカレントディレクトリ、ホームディレクトリの順で” .bioViewer”という名称のファイルを読み込みます。もしファイルがあればその設定が反映されます。

**Set Default Value** でデフォルトの値が設定されます。

## 2) Rotation

① Speed ViewPointの Rotation を選択した場合の回転速度を指定します。

## 3) Projection

投影法を指定します。Parallel の場合はマウスでの拡大縮小ができなくなります。  
Viewpointメニューの Rotation/Transration/Magnify で拡大縮小を行ってください。

## 4) Connect Atom

ボンドの表示判定をファンデル・ワールス半径、共有結合半径のどちらを使用するかを指定します。Scale を指定することにより判定値を scale up/down することができます。

## 5) Resolution

- ① Line Width : ワイヤーフレーム表示の太さを指定します。
- ② C $\alpha$  Line With : C $\alpha$  [Line]表示の表示の太さを指定します。
- ③ Ball : ボールアンドスティック表示の解像度を表示します。
- ④ Sthick : スティック表示の解像度を表示します。
- ⑤ CPK : 空間充填モデルの解像度を表示します。
- ⑥ Tube : C $\alpha$  [tube]表示の解像度を表示します。
- ⑦ Ribbon Width : Ribbon 表示の幅
- ⑧ Ribbon Height : Ribbon(Solid)表示の高さ
- ⑨ Ribbon Line Width : Ribbon(Line)の線の幅
- ⑩ Cartoon  $\alpha$  Head Height : Cartoon の  $\alpha$  の円錐の高さ
- ⑪ Cartoon  $\alpha$  Radius : Cartoon の  $\alpha$  の胴の半径
- ⑫ Cartoon width : Cartoon の幅
- ⑬ Cartoon  $\beta$  Height : Cartoon のベータの高さ

## 6) Radius

- ① Ball : ボールアンドスティック表示のボールの大きさを指定します。
- ② Bond : ボールアンドスティック表示のボンドの太さを指定します。
- ③ Stick : スティック表示の太さを指定します。
- ④ Tube : C $\alpha$  [tube]表示の Tube の太さを指定します。

## 7) Color

- ① **Background** : 表示の背景色を指定します。
- ② **Atom** : 各原子の表示色を指定します。指定画面を図 2.64 に示します。

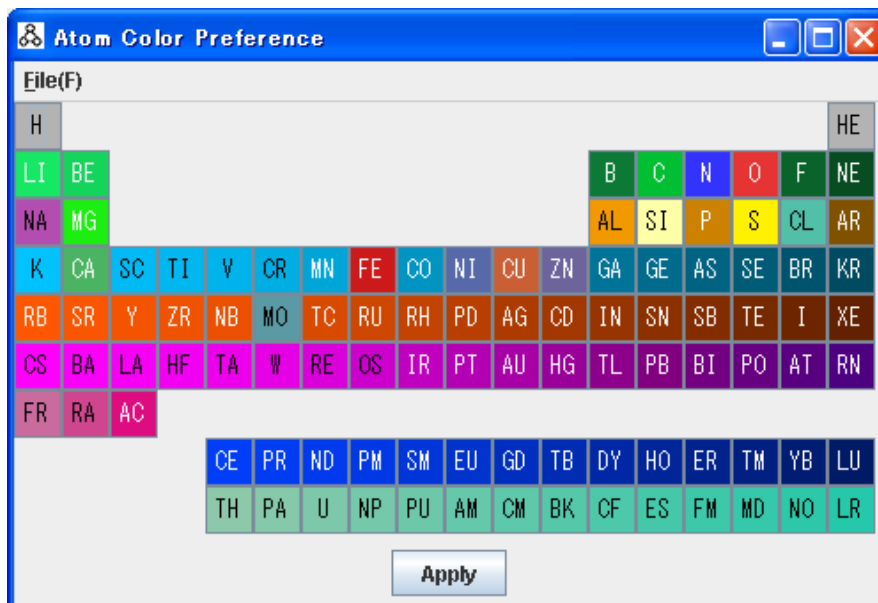


図 2.64 原子の表示色指定画面

- ③ **Residue** : 各残基の表示色を指定します。指定画面を図 2.65 に示します。
- ④ **Fragment** : フラグメントの表示色を指定します。指定画面を図 2.66 に示します。フラグメント、チェーン、ファイルは 8 色でサイクリックに色付けされます。
- ⑤ **Chain** : チェーンの表示色を指定します。デフォルトの色は **Fragment** と同じです。
- ⑥ **File** : ファイルの表示色を指定します。デフォルトの色は **Fragment** と同じです。
- ⑦ **DNA:DNA** の ATGC の表示色を指定します。
- ⑧ **Isosurface** : 等値面の色を指定します。指定画面を図 2.67 に示します。
- ⑨ **Selected** : 選択項目の色を指定します。

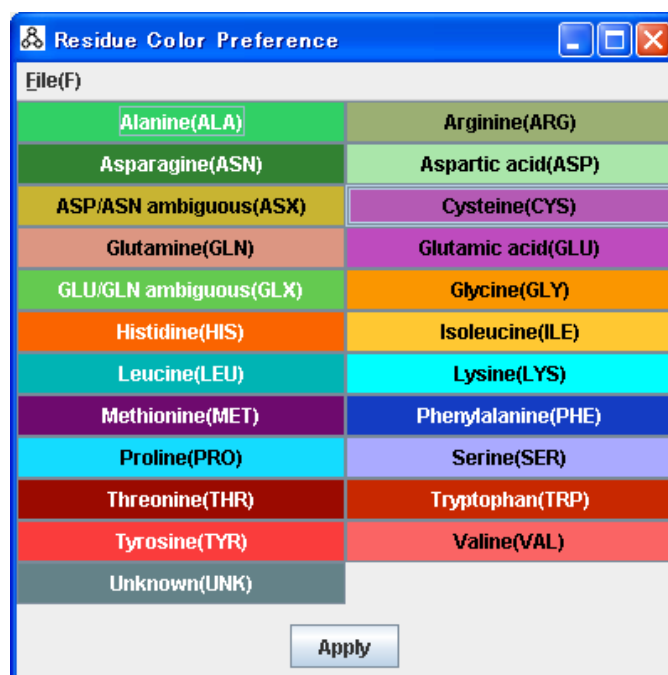


図 2.65 残基の表示色指定画面



図 2.66 フラグメントの表示色指定画面

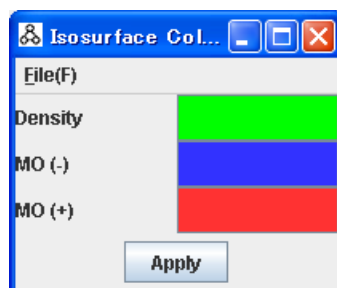


図 2.67 等値面の表示色指定画面



8) **Arrow**:ベクトル表示の形式を指定します。”Apply”ボタンをクリックすると表示が変わります。指定画面を図 2.68 に示します。

**Arrow(Trajectory)**:トラジェクトリーのベクトル表示の形式を指定します。

**Arrow(Dipole moment HF)**:HFのDipole momentのベクトル表示の形式を指定します。

**Arrow(Dipole moment MP2)**:MP2のDipole momentのベクトル表示の形式を指定します。

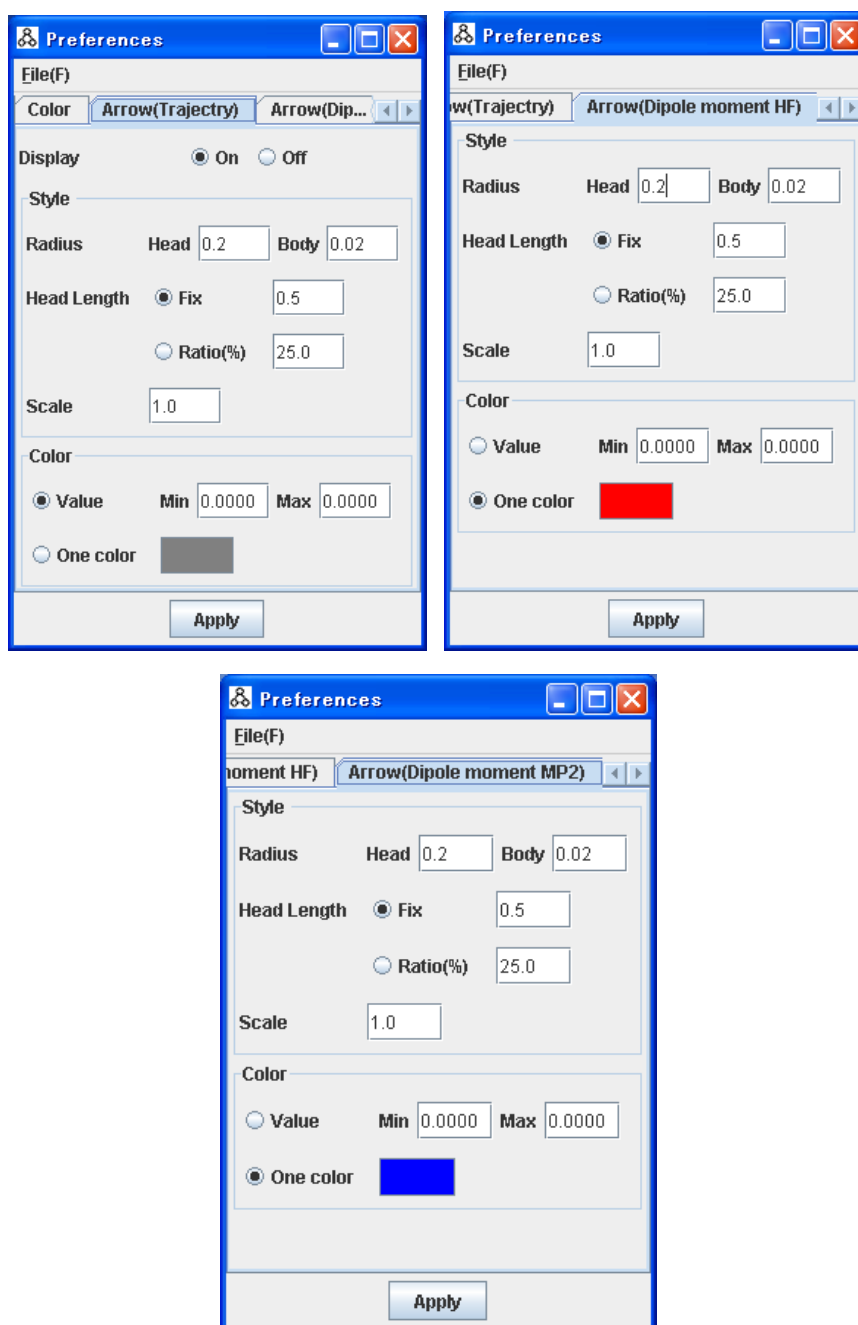


図 2.68 ベクトル表示形式指定画面

- ① **Display** 矢印の表示の有無を指定します。**Dipole moment** は、Toolメニューで表示を制御するのでこの項目はありません。
  - ② **Style** 形式を指定します。
    - 1. **Radius** 矢印の頭と胴体の太さを指定します。
    - 2. **Head Length** 矢印の頭の大きさを、固定にするのか全体に対する割合にするのかを指定します。
    - 3. **Scale** 矢印の長さのスケールを指定します。ファイルに記述のあるベクトルの長さで表示します。表示の1の長さは1Åです。
  - ③ **Color** 色付けを指定します。
    - 1. **Value** 最小値、最大値を指定して、青→緑→赤に変化させます。
    - 2. **One color** 指定した単一色で色付けします。
- 9) **Numbe of decimal**: 3D表示の角度、距離、IFIEの値の小数点以下の桁数を指定します。”Apply”ボタンをクリックすると次の指定から表示が変わります。指定画面を図2.69に示します。

Number of decimal	CHPI	Multi La...
Angle	1	
Distance	3	
Interaction Energy	3	

図 2.69 小数点以下桁数指定画面

- 10) **CHPI** CHPIの結果表示の形式を指定します。指定画面を図2.70に示します。
- ① **Model** 表示形式を Line Solid/Line Dash/Stick から選択します。
  - ② **Color** 色を指定します。
  - ③ **Line Width** 線の太さを指定します。
  - ④ **Stick Radius** Stickの半径を指定します。

Number of decimal	CHPI	Multi La...
Model	Line Dash	
Color	Set	
Line Width	3	
Stick Radius	0.1	

図 2.70 CHPI 指定画面

11) Multi Layer QM/MM の層ごとの表示色を指定します。指定画面を図 2.71 に示します。

- ① High Layer Color High Layer の色を指定します。
- ② Middle Layer Color Middle Layer の色を指定します。



図 2.71 Multi Layer 指定画面

12) Font フォントサイズを指定します。

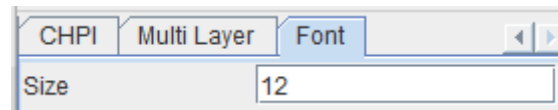


図 2.72 フォントサイズ 指定画面

- ◆ **Display Axis** 座標軸を画面の左下に表示することの有無を指定します。
- ◆ **Display Direction** ファイルごとのキーによる移動方向を表示の有無を指定します。

#### 2.2.10 Help ヘルプ機能

- ◆ **View Help(Japanese/English) Web** ブラウザを起動してマニュアルを表示します。(日本語、英語)

## 2.3 断面指定

格子データを読み込んだ場合は、Section→Set ボタンを押下することで任意の断面を表示可能です。格子データを読み込んだ場合は、その断面表示化可能です。断面指定は GUI 上より、中心点の指定、回転角の指定または断面の法線ベクトルで行います。断面表示形式はFRINGE、等値線が選択でき、入力するファイルの値により色付けされます。色付けの範囲も指定できます。複数の断面の表示が可能です。図 2.73 に断面指定の説明図を、図 2.74 に断面指定画面を示します。

表示指定を次に説明します。

- No.  
指定している断面の番号を示します。”Add”ボタンをクリックすると断面指定が追加されます。断面指定は 3D 表示で白の半透明の面で表示されます。”delete”ボタンをクリックするとその番号の断面が削除されます。

- Assign Section Plane 断面の位置指定。タブで Center と Angle を切り替えます。

- Center

断面の中心点の座標(X,Y,Z)を指定します。スライダーによる指定か、座標を入力してリターンキーを押すことにより断面が移動します。

- Angle

スライダーによる指定(Rotation)と断面の法線ベクトル(Vector)のいずれかで指定できます。スライダーによる指定では、面の紫の軸を中心にAが、オレンジを中心にBが回転します。Cは、面に垂直な軸を中心に回転します。

法線ベクトルは、x, y, z の値を入力してリターンキーを押すことにより移動します。

- Set Plane

xy,yz,xz 平面の断面を表示します。

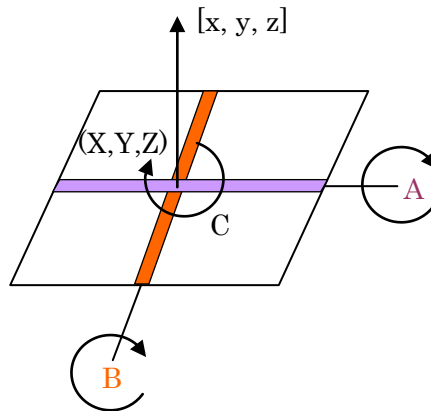


図 2.73 断面の指定の説明図

- Section Property 断面の表示形式指定

- Display

表示の有無を指定します。

- Value

表示する物理量を選択します。

- Color Range

色付けの値の範囲を指定します。

➤ Type

フリンジか等値線かを指定します。

➤ Transparency

フリンジの透明度を指定します。

➤ Number of Lines

等値線の数指定します。分子軌道の場合は $\pm 1e-8$ を0として処理しています。

➤ Draw

”Draw”ボタンをクリックすると断面が表示されます。

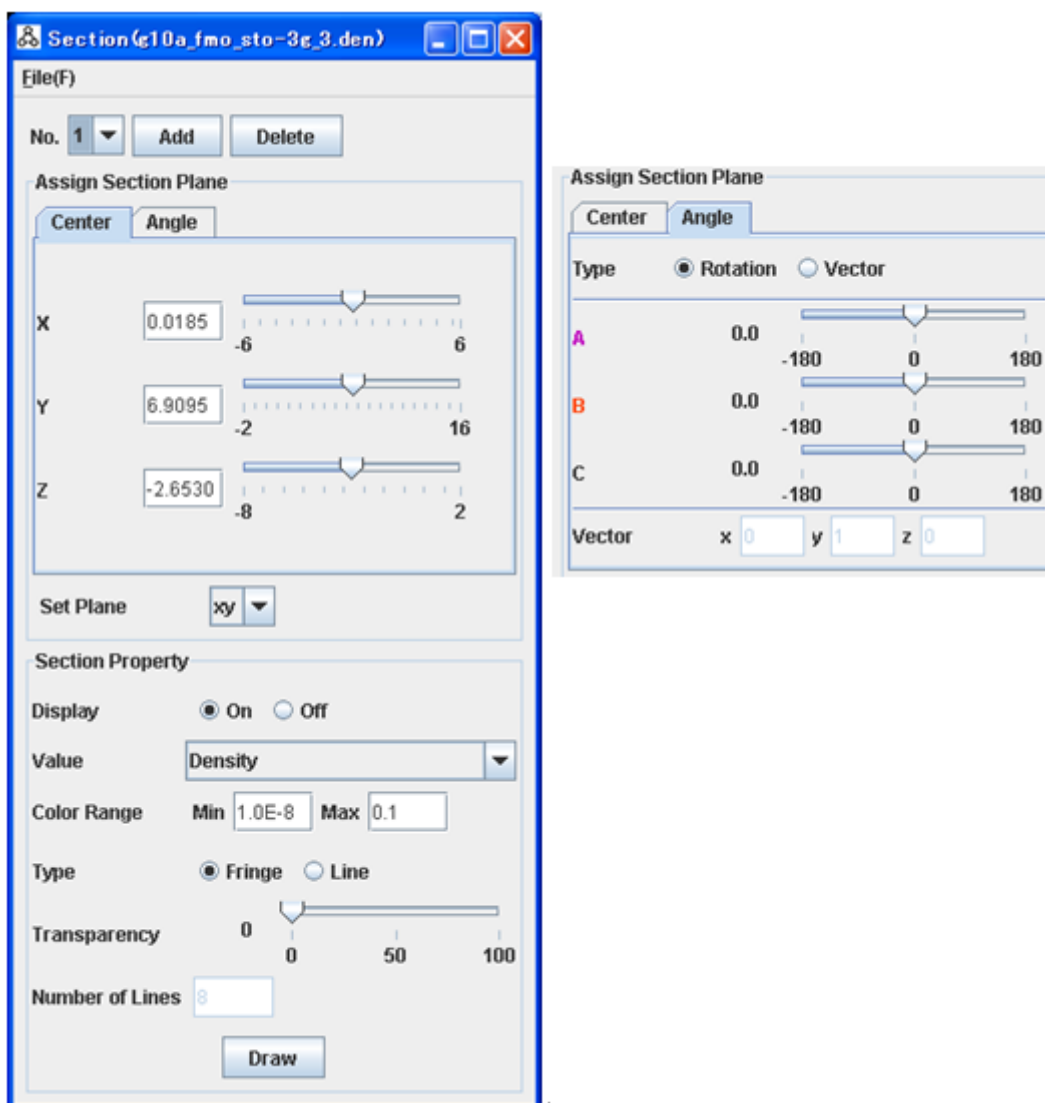


図 2.74 断面指定画面

## 2.4 トラジェクトリー機能

File→Open Fileでトラジェクトリーファイルを選択すると時系列に構造変化が表示されるトラジェクトリー表示ができます。

### 2.4.1 ファイル形式

ファイル形式は2つあります。

1) 拡張子は、trj です。trj は各ステップのエネルギーの値を含んだファイルです。はじめに原子数を記述し、その後はステップごとのエネルギーの値、各原子の座標を記述します。エネルギーがない場合は0を記述しておいてください。

#は行末までコメントです。

2008年12月にフラグメント識別のため、行の最後にフラグメント番号の記述を追加しました。フラグメントの必要が無ければ記述が無くてもかまいません。

ファイル読み込み前に、Color→Fragmentを選択すると、フラグメント単位で色づけされた表示で時系列の表示が可能です。

ファイル例

```
1000      #原子数
# step 0
9.87654  #エネルギー
O 1.23345678 1.23345678 1.23345678
H 1.23345678 1.23345678 1.23345678
N 1.23345678 1.23345678 1.23345678
C 1.23345678 1.23345678 1.23345678
.....
# step 1
9.87654  #エネルギー
O 1.23345678 1.23345678 1.23345678
H 1.23345678 1.23345678 1.23345678
N 1.23345678 1.23345678 1.23345678
C 1.23345678 1.23345678 1.23345678
.....
```

フラグメント番号ありの例

```
1000      #原子数
# step 0
9.87654  #エネルギー
O 1.23345678 1.23345678 1.23345678 1
H 1.23345678 1.23345678 1.23345678 1
N 1.23345678 1.23345678 1.23345678 1
C 1.23345678 1.23345678 1.23345678 2
.....
# step 1
9.87654  #エネルギー
O 1.23345678 1.23345678 1.23345678 1
```

```
H 1. 23345678 1. 23345678 1. 23345678 1
N 1. 23345678 1. 23345678 1. 23345678 2
C 1. 23345678 1. 23345678 1. 23345678 2
.....
```

## 2) 新トラジェクトリーファイル

拡張子は、**trj2**, **tj2**, **tr2**のいずれかです。**XYZ**形式の拡張です。ステップごとに原子数、コメント、原子の座標、ベクトル値が記述されています。コメントは、タグ、値の組で表現し、この値でグラフを表示します。タグが **Label** の場合は **3D** 表示のテキストとなります。タグと値の間に”=”を挿入し、項目間は”,”があってもかまいません。ベクトルの表示属性の変更は **Preference** 指定の **Arrow** を参照してください。

例

```
8
label="MD step 1" Ekin(Ha)=0.000000000 Epot(Ha)=-31.6395526318 Etot(Ha)=-31.6395526318
Fmax(Ha/bohr)=0.1505408174
Si 0.8686973703168 0.5700826492704 0.67866982056 -0.090561 0.076468 -0.082145
Si 4.6421015726304 4.7235419510976 4.75068874392 0.026857 0.018088 0.002683
Si 0.67866982056 3.4204958956224 3.5019362740896 -0.022970 0.000783 -0.024173
Si 4.75068874392 2.03600946168 2.03600946168 0.032733 -0.001620 -0.002599
Si 3.4204958956224 0.7872569918496 3.3933491028 -0.012222 -0.029104 -0.017059
Si 1.764541533456 4.886422708032 2.03600946168 0.101043 -0.077951 0.079853
Si 3.5019362740896 3.3933491028 0.7058166133824 -0.050445 -0.000565 0.003814
Si 2.03600946168 2.0088626688576 4.6421015726304 0.015567 0.013899 0.039625
8
label="MD step 2" Ekin(Ha)=0.0000001274 Epot(Ha)=-31.6395536508 Etot(Ha)=-31.6395535234
Fmax(Ha/bohr)=0.1505348131
Si 0.868696441081553 0.570083434040259 0.678668977580644 -0.090558 0.076465 -0.082141
Si 4.64210184833175 4.72354213683881 4.75068877143722 0.026857 0.018087 0.002683
Si 0.678669585076125 3.42049590356006 3.50193602590547 -0.022970 0.000783 -0.024173
Si 4.75068907994755 2.0360094452755 2.03600943522114 0.032732 -0.001620 -0.002599
Si 3.42049577020739 0.787256693393632 3.39334892764233 -0.012222 -0.029103 -0.017058
Si 1.76454257011423 4.88642190844518 2.03601028084638 0.101040 -0.077948 0.079849
Si 3.50193575655425 3.39334909697905 0.705816652541516 -0.050443 -0.000565 0.003814
Si 2.03600962149153 2.00886281120628 4.64210197903853 0.015567 0.013899 0.039623
.....
```

## 2.4.2 表示指定

メイン画面のメニューバーの **File**→**Open File** でトラジェクトリーファイルを指定して入力してください。ファイル読み込み時に表示処理を行います。ステップ数、原子数、表示形式に比例して処理時間がかかります。処理時間の目安は、Pentium 4 2GHz、100 原子、100 ステップ、ワイヤーフレームで 25 秒、ボールアンドスティックで 40 秒です。処理が終わると図 2.75 に示すトラジェクトリー操作画面が表示されます。グラフ用のデータがファイルに記述されていた場合はそのグラフを縦に並べて操作パネルの上に表示します。

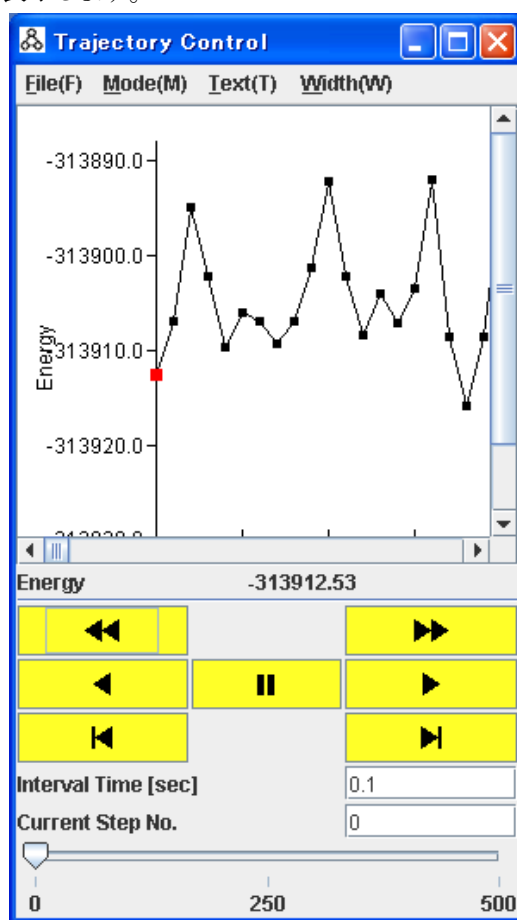


図 2.75 トラジェクトリー操作画面

### 1) メニューの説明

- File メニュー

- ◆ Create image files

ビデオファイル作成用の各ステップの表示イメージを jpeg 形式で imageXXX.jpg のファイル名で指定されたディレクトリに格納します。XXX には通し番号が入ります。このメニューを選択するとディレクトリ指定の画面が表示されます(図 2.76)。Output Folder にフ



ファイルを格納するフォルダーを指定してください。Screen Size を指定して **Apply** ボタンをクリックすると 3D 表示が指定の大きさになります。表示の大きさによりビデオファイルの容量が代りますので、必要に応じて調整してください。ここで、”**Create**”ボタンをクリックすると各ステップが表示されファイルが作成されます。ただし、CPU、グラフィックカードの性能によりコマ落ちすることがあるのでご注意ください。

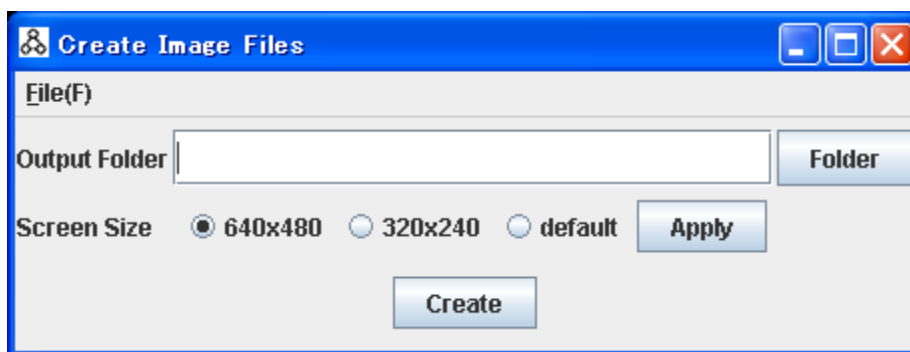


図 2.76 イメージファイル作成指定画面

◆ Create Video File

ビデオファイルを作成します。指定ダイアログを図 2.77 に示します。**InputFolder** は、**Create image files** で作成した jpeg ファイルを格納しているフォルダを指定します。**Output File Name** は、出力するファイル名を指定します。**Frame Rate** は、1秒あたりのフレーム数を指定します。**Video Format** は、MSVIDEO/Quick Time のいずれかを指定します。MSVIDEO は、ファイル容量が大きくなりますが、Power Point で貼り付けて表示できます。Quick Time は、ファイル容量は小さくなりますが表示には Quick Time の Player が必要です。

**Create** ボタンをクリックするとビデオファイルが作成されます。

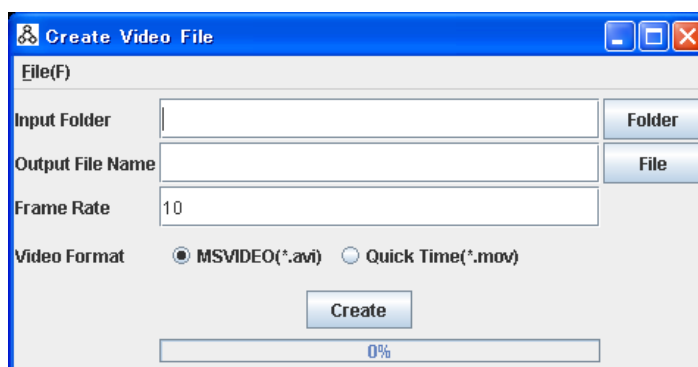


図 2.77 ビデオ作成指定画面

- ◆ Save Graph Image File  
表示されているグラフを、JPEG,PNG または Postscript ファイルとして保存できます。ファイル選択画面で指定されたファイル名の拡張子で形式は判断します。
- ◆ Close  
画面を閉じます。
- Mode
  - ◆ Cyclic  
連続的に再生します。
- Text  
3D テキストの表示属性を指定します。フォント、スタイル、サイズ、色、表示位置が指定可能です。指定を変更して”Apply”ボタンをクリックすると変更が反映されます。図 2.78 に指定画面を示します。

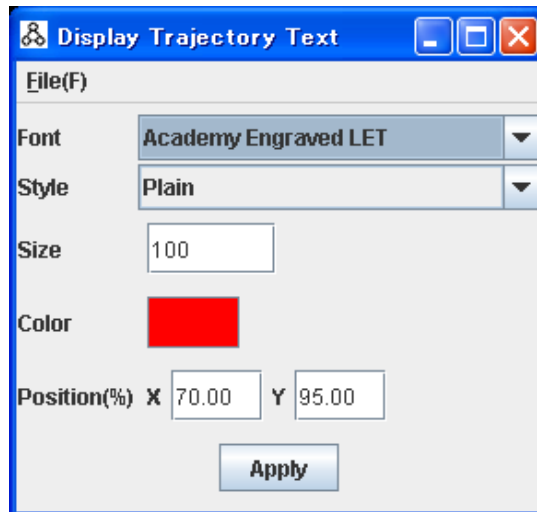









図 2.78 テキスト指定画面

- Width
  - ◆ Ajust  
グラフ横軸の大きさを表示ウインドウの大きさに合わせて、全体が表示されるようにします。デフォルトでは一定間隔で表示され、カレントのステップが見えるように表示されます。

## 2) 操作パネルの説明

-  top  
先頭のステップを表示します。
-  reverse  
逆再生します。
-  back  
1 ステップ戻ります。
-  stop  
再生をストップします。
-  tail  
最後のステップを表示します。
-  play  
順再生します。
-  forward  
1 ステップ進めます。
- Interval Time [sec]  
表示間隔を指定します。あまり小さな値を表示しても限界があります。
- Current Step No.  
表示しているステップ番号を表示します。番号をキー入力してリターンキーを押すとそのステップが表示されます。ステップ番号は 0 から始まります。
- スライダーバー  
表示ステップを指定します。

## 2.5 VISCANA 機能

VISCANA (Visualized Cluster Analysis)は、あるタンパク質に対して、複数のリガンドを適用したときの、それぞれのケースのタンパク質とリガンドとの相互作用の値により、クラスター解析を行い、その結果を表示するものです。

複数の CPF ファイルを使用しますが、アライメント情報が無い場合は、フラグメント数は同じでなくてはなりません。アライメント情報を使用した例は、チュートリアル 0 節に示します。

VISCANA メニューを選択すると 図 2.79 の VISCANA 画面が表示されます。左側にクラスター解析の結果のデンドログラムを表示し、真ん中は、リガンド名を示し、バインディングエネルギーの値で色付けされています。マウスをリガンド名の上に持っていくとバインディングエネルギーの値が表示されます。右側は各フラグメントの相互作用エネルギーを示しています。

マップ上にマウスを置くと、ポップアップの表記で、ファイル名、seq.は複数の Check Point File (以下 CPF)間で共通となるアラインメント後の配列番号を、frag.=各 CPF 個別のフラグメント番号を表示します。

表示は 3D 表示と連動しており、右側のフラグメントをマウスで選択し、”3D Model View”ボタンをクリックすると、3D 表示に構造が表示され、指定されたフラグメントが強調表示され、フラグメントの位置がどこであるかが容易にわかるようになっています。(図 2.80)

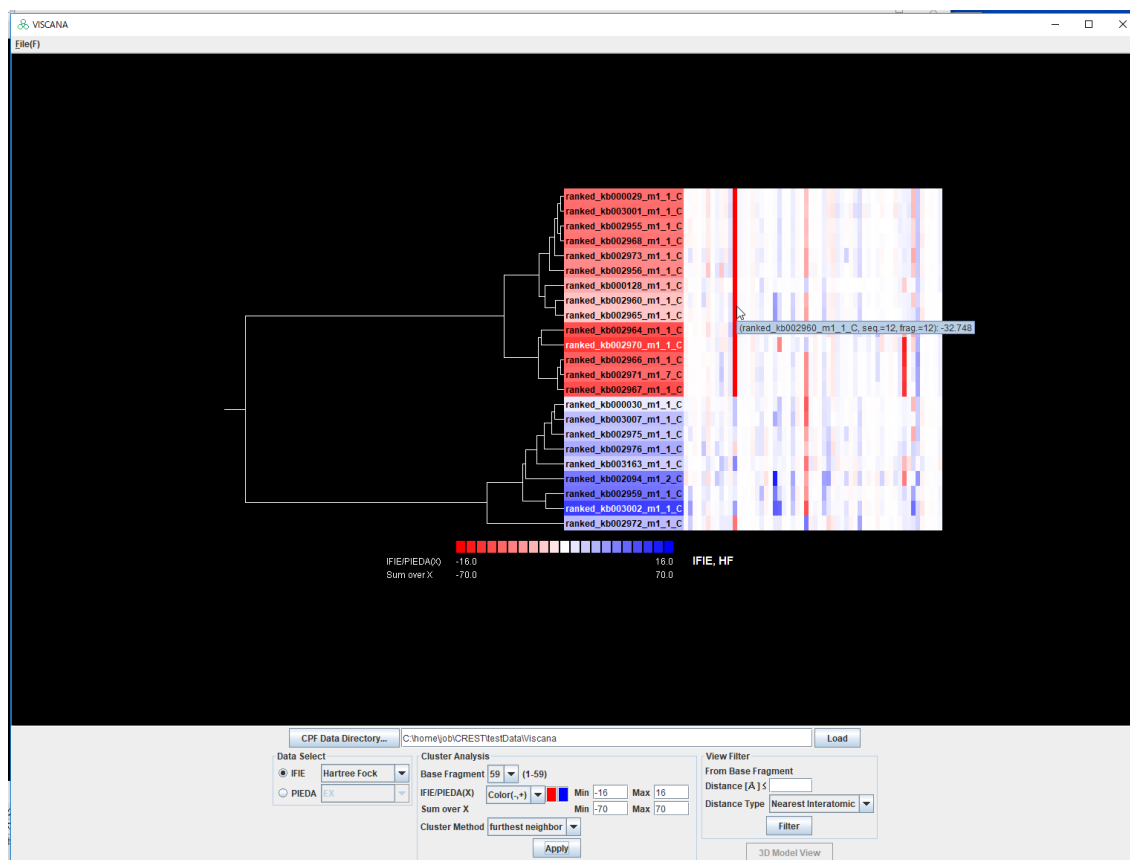
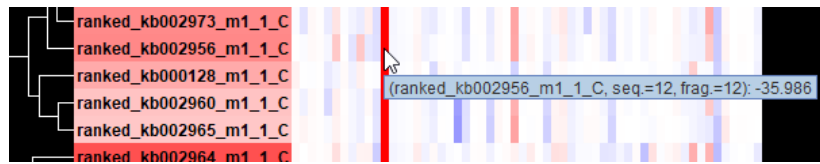


図 2.79 VISCANA 画面



kb002956\_m1\_1\_C.cpfの 12 番のフラグメントを選択 “3D Model View”ボタンをクリック

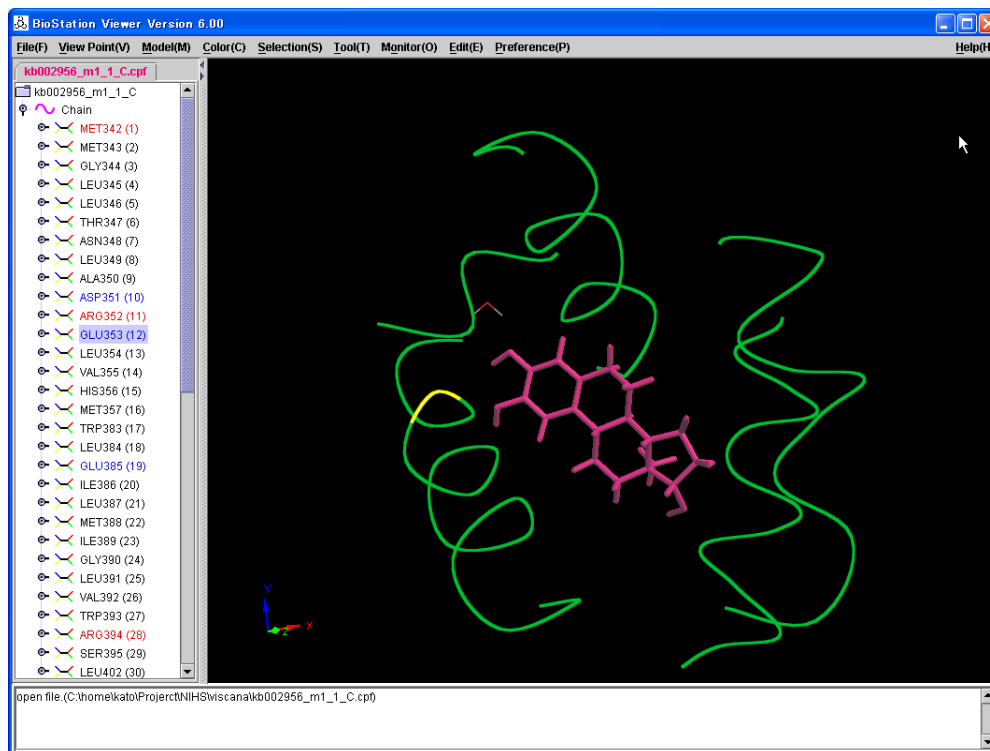


図 2.80 12 番のフラグメントを強調表示

入力項目を説明します。

#### 1)メニューの説明

- File メニュー
  - ◆ Load CSV File
 

CSV ファイルを読み込み表示します。CSV ファイルの形式は、1行が  
ファイル名, フラグメント 1 の値, フラグメント2の値, ...フラグメント N の値  
であり、これが複数行続く形式です。
  - ◆ Save image
 

表示された結果を PNG,Tiff または JPG ファイルに格納します。
  - ◆ Save CSV file (Raw data)
 

CPF によって読み込んだ各種相互作用エネルギーを生データとして切り出して出力する

```
"1ERE H2O EST600","0.06704805904155364","0.004935882592690177","-0.004161305550951511","-0.003949102
"1L2J ETC600","0.09012984097353183","-0.01233636905089952","-0.06828176585258916","-0.01509068469749
"2IOG IOG1","0.017258612366276793","-0.001573896166519262","0.018046159180812538","0.007235390599817
"1QKM GEN600","0.06880561851721723","-0.021663096427801065","0.014909053323208354","0.00948922598036
"1U3Q 272501","0.03297848604415776","-0.022831991052953526","-0.029928279720479622","-0.030791792451
```

図 2.81 Save CSV file (Raw data)の出力

◆ Save CSV file (filtered data)

Base Fragment からの距離によって選択されたフラグメントに対する相互作用エネルギーのみを出力する。ユーザーは出力ファイル名を指定(例: IFIE\_filtered.csv)し、それに対応するファイル名(例: IFIE\_filtered\_fragment\_number.csv)にて、インデックス情報が出力される。出力されるインデック情報は、ポップアップの情報と同一である。

```
"1ERE H2O EST600","0.06704805904155364","0.004935882592690177","-0.004161305550951511","-0.003949102
"1L2J ETC600","0.09012984097353183","-0.01233636905089952","-0.06828176585258916","-0.01509068469749
"2IOG IOG1","0.017258612366276793","-0.001573896166519262","0.018046159180812538","0.007235390599817
"1QKM GEN600","0.06880561851721723","-0.021663096427801065","0.014909053323208354","0.00948922598036
"1U3Q 272501","0.03297848604415776","-0.022831991052953526","-0.029928279720479622","-0.030791792451
```

a) 出力ファイル

```
"1ERE H2O EST600","1;19;19","1;20;20","1;21;21","1;33;33","1;34;34","1;35;35","1;36;36","1;37;37","1
"1L2J ETC600","2;19;17","2;20;18","2;21;19","2;33;30","2;34;31","2;35;32","2;36;33","2;37;34","2;38;
2IOG IOG1","5;19;17","5;20;18","5;21;19","5;33;30","5;34;31","5;35;32","5;36;33","5;37;34","5;38;35"
"1QKM GEN600","3;19;17","3;20;18","3;21;19","3;33;30","3;34;31","3;35;32","3;36;33","3;37;34","3;38;
"1U3Q 272501","4;19;17","4;20;18","4;21;19","4;33;30","4;34;31","4;35;32","4;36;33","4;37;34","4;38;
```

b) インデック情報

図 2.82 Save CSV file (Raw data)の出力

◆ Close

この画面を閉じます。

2) CPF Data Directory

VISCANA 機能で表示するデータのディレクトリを指定します。”Directory”ボタンをクリックするとディレクトリ指定画面が表示されます。”Load”ボタンをクリックするとファイルが読み込まれます。ファイルが読み込まれると”View”ボタン、下のリガンド指定のボタンが有効になります。”View”ボタンは、VISCANA の結果表示され、表示されているフラグメントを選択してクリックすると、3D 表示に構造が表示され、指定されたフラグメントが強調表示されます。結果ファイルは同じタンパク質に異なるリガンドを適用し計算された CPF ファイル群で、アライメント情報が無い場合は、フラグメント数は同じでなくてははいけません。アライメント情報を使用した例はに示します。

3) データ選択(Data Select)

クラスタリングに用いる IFIE の種類や PIEDA の成分を選択します。クラスタリング配列の選択インターフェースを図 2.83 に、凡例への選択成分の表示例を図 2.84 に示します。

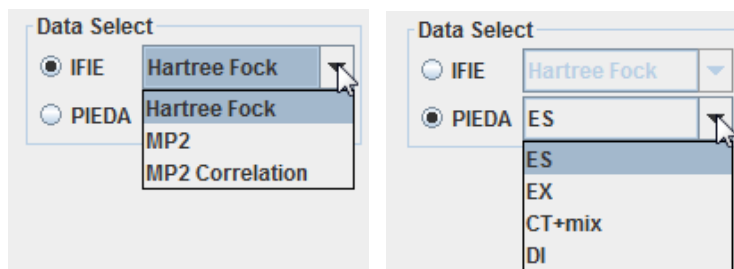


図 2.83 クラスタリング配列の選択 (左: IFIE、右: PIEDA)



図 2.84 クラスタリング配列の凡例への表示: IFIE, HF (Hartree Fock) の例

#### 4) クラスタパラメータ指定(Cluster Analysis)

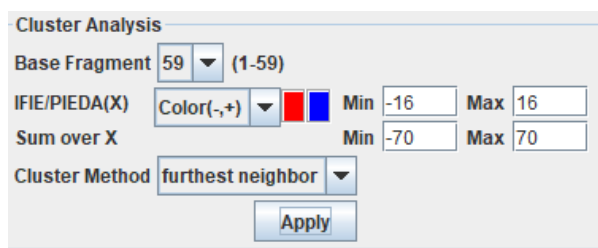


図 2.85 クラスタパラメータ指定

- **Base Fragment**  
クラスタ分析の基準となりフラグメント番号を指定します。
- **IFIE/PIEDA(X)**  
相互作用エネルギーの色付けの値の範囲、色を指定します。指定しない場合は、ファイルから読み込まれた値の最大値、最小値を使用します。
- **Sum over X**  
バインディングエネルギーの色付けの値の範囲を指定します。指定しない場合は、ファイルから読み込まれた値の最大値、最小値を使用します。
- **Cluster Method**  
クラスタ解析の手法を選択します。以下の手法が用意されています。
  - furthest neighbor 最長距離法
  - nearest neighbor 最短距離法
  - group average 群平均法
  - centroid 重心法

- median メジアン法
- Ward ウォード法
- flexible フレキシブル法
- Apply  
“Apple”ボタンをクリックすると、指定の値で再表示します。

#### 5) 表示フィルタ(View Filter)

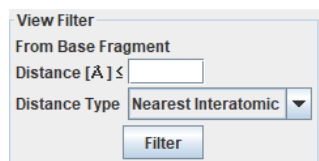


図 2.86 表示フィルタ指定

- Distance  
Base Fragment からの距離内にあるフラグメントのみを表示する。
- Distance Type  
距離内判定の方式を指定する  
Nearest Interatomic：最近接の原子間距離  
Center of mass：フラグメントの重心からの距離
- Filter  
“Filter”ボタンをクリックすると、指定の値で再表示します。



## 2.6 IFIE MAP 表示機能

IFIE MAP はフラグメント間の相互作用エネルギーの値で色づけされた2次元 MAP 表示で、右、上に二次構造を色で表示します。表示は拡大縮小が可能で、マウスにより値に表示、3D表示との連携が可能です。

File->Open File でチェックポイントファイルを読み込みます。Monitor->IFIE MAP を選択し、IFIE 表示画面を表示します。Apply ボタンをクリックすると IFIE MAP が表示されます。表示例を以下に示します。

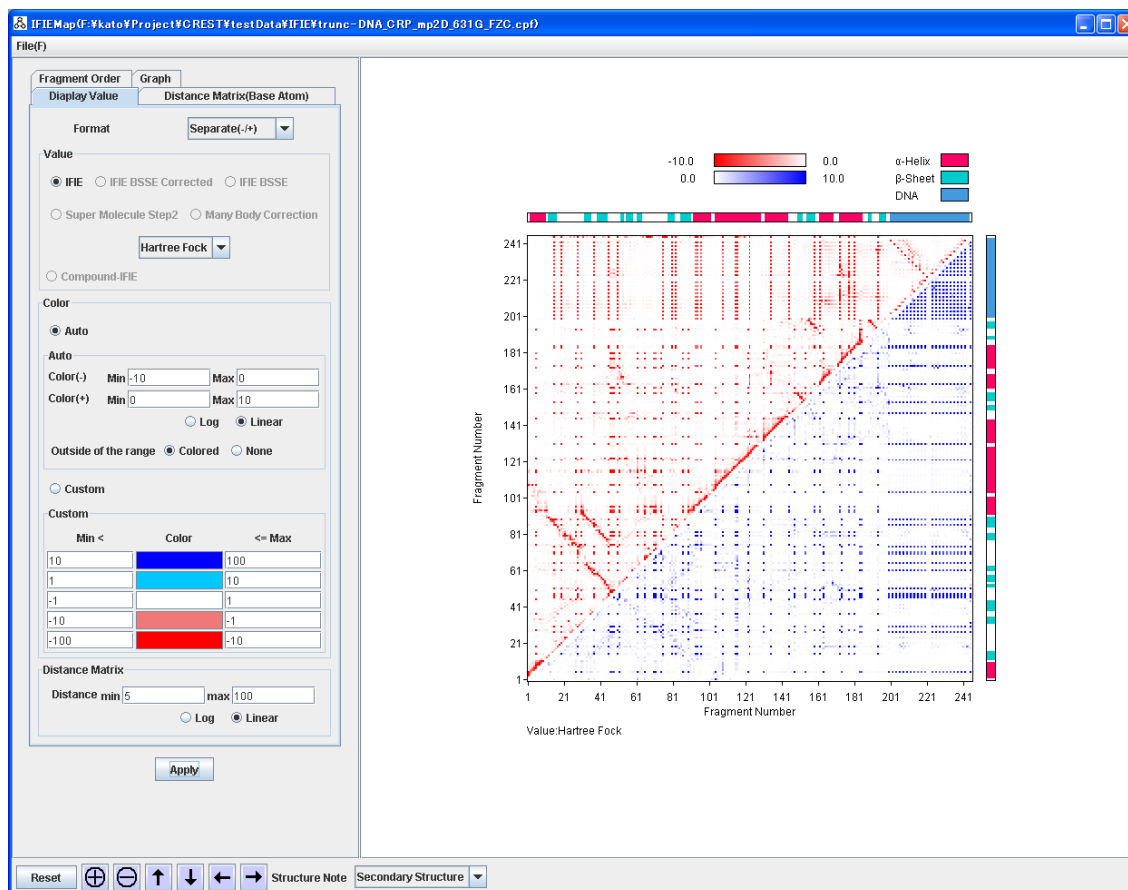


図 2.87 IFIE MAP 表示画面

表示指定項目を説明します。

### 1)メニューの説明

- File メニュー
  - ◆ Save image  
表示された結果を PNG/Tiff/Jpeg ファイルに格納します。
  - ◆ Save text  
表示された結果(インデックス、値)をテキストファイルに格納します。
  - ◆ Close  
この画面を閉じます。

## 2) 表示パラメータ設定

表示パラメータは、タブを切り替えてそれぞれの属性を指定します。指定後”Apply”ボタンをクリックすると表示が変更されます。

- Display Value

値指定のパネルを図 2.88 に示します。

The screenshot shows the 'Display Value' panel with the following settings:

- Format:** Separate(-/+)
- Value:** IFIE (selected), IFIE BSSE Corrected, IFIE BSSE, Super Molecule Step2, Many Body Correction, Hartree Fock (selected), Compound-IFIE
- Color:** Auto (selected), Color(-) Min: -10, Max: 0, Color(+) Min: 0, Max: 10, Log, Linear (selected), Outside of the range: Colored (selected), None
- Custom:**

Min <	Color	<= Max
10	Blue	100
1	Cyan	10
-1	White	1
-10	Red	-1
-100	Dark Red	-10

- Distance Matrix:** Distance min: 5, max: 100, Log, Linear (selected)

Apply

図 2.88 IFIE MAP 値指定画面

◆ Format

3つの表示形式が選択できます。

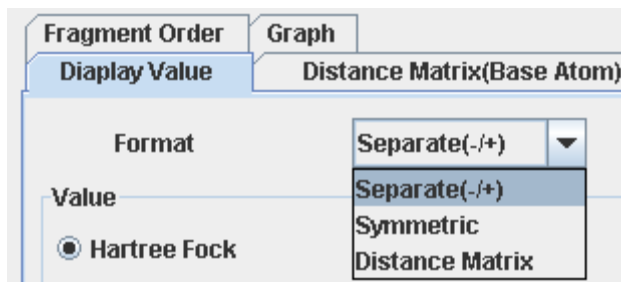


図 2.89 Format 指定

- **Separate(-/+)**  
左にマイナスの値を、右にプラスの値を表示します。表示例を図 2.87 に示します。
- **Symmetric**  
マイナスの値、プラスの値を表示します。表示例を図 2.90 に示します。
- **Distance Matrix**  
左に **Symmetric** 表示、右に各フラグメント間の距離を表示します。距離の基準となる原子は次の項目で指定します。表示例を図 2.91 以下に示します。

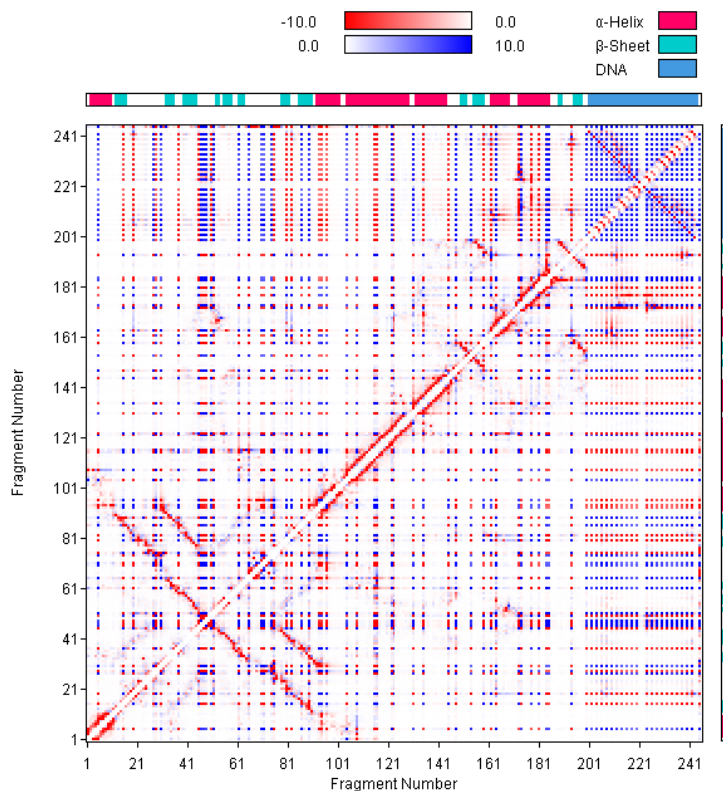


図 2.90 Symmetric 表示例

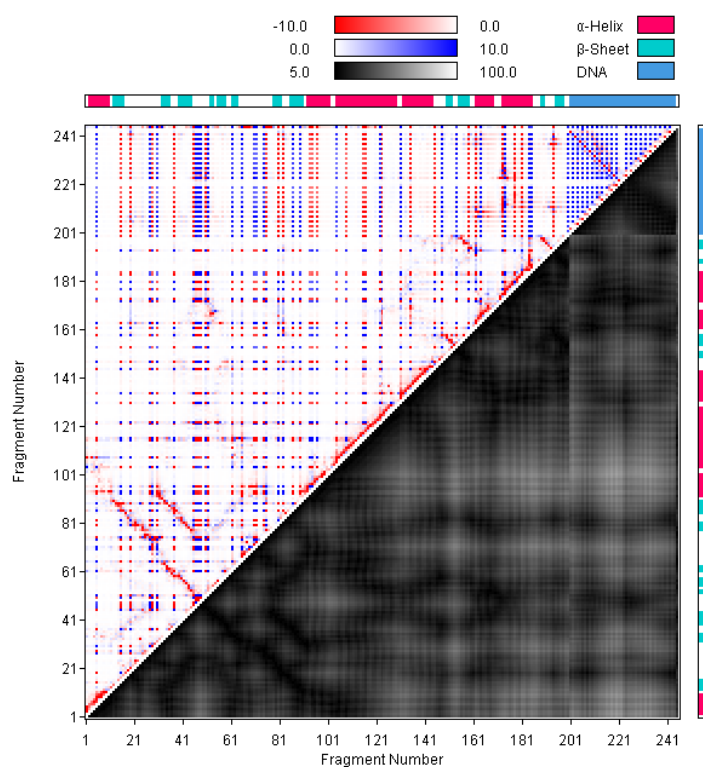
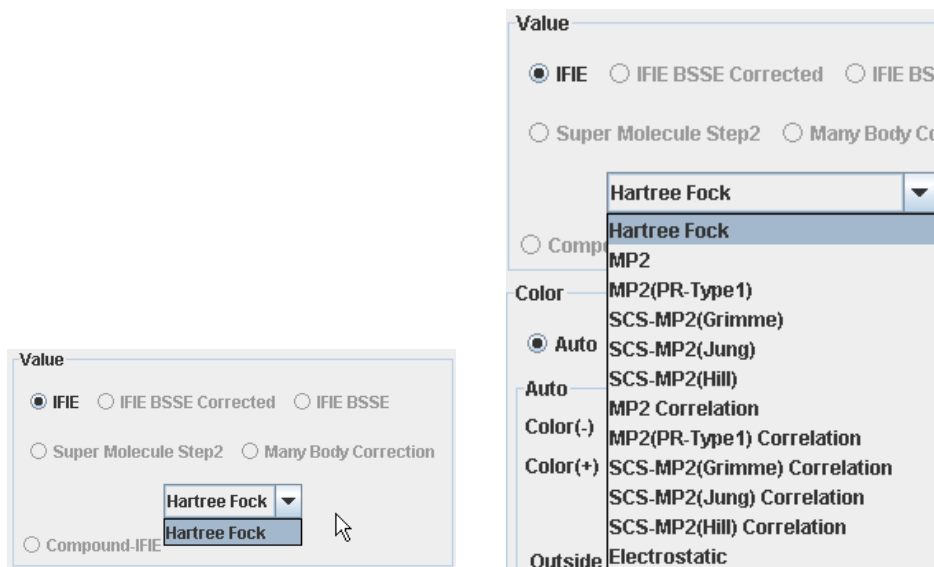


図 2.91 Distance Matrix 表示例

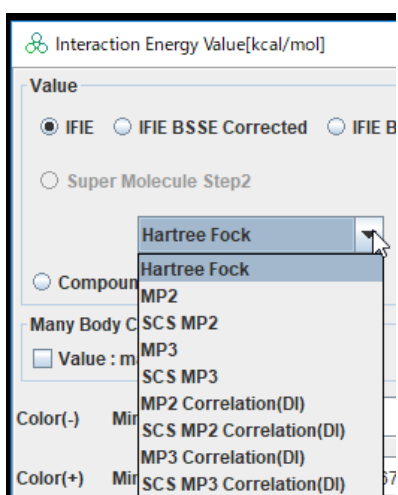
◆ Value

表示する値を選択します。CPF のバージョンにより選択できる項目が変わります。各 Version の選択画面を図 2.92 に示します。表示するエネルギーを選択し、”Apply”ボタンをクリックすると、そのエネルギーで MAP が表示されます。

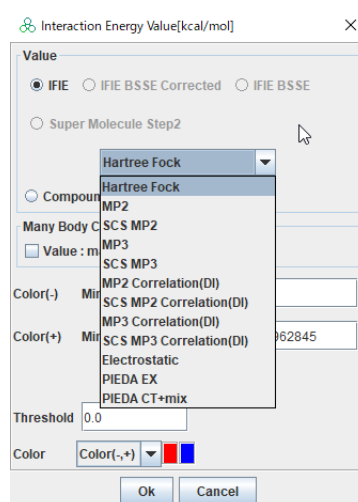


a) Version1

b) Version2



c) Version3,4.-4.2, 7.0



d) Version 4,201, 7.0-4.0, Open1.0 rev10

図 2.92 各 CPF での IFIE 選択値

超分子計算結果を読み込んだ場合は、**Super Molecule Step2** が有効になり、これを選択すると超分子計算の **Step2** の計算結果で MAP が表示されます。

多体項の計算結果を読み込んだ場合は、**Many Body Correction** が有効になり、これを選択すると多体項の補正值で MAP が表示されます。

Version3 の場合は、Compound-IFIE が選択可能で、図 2.93 が表示されます。これは、複数の結果を足し合わせた値を表示するための指定画面です。Coefficient に係数を指定し、Value を選択します。フラグメント数は同じである必要があります。

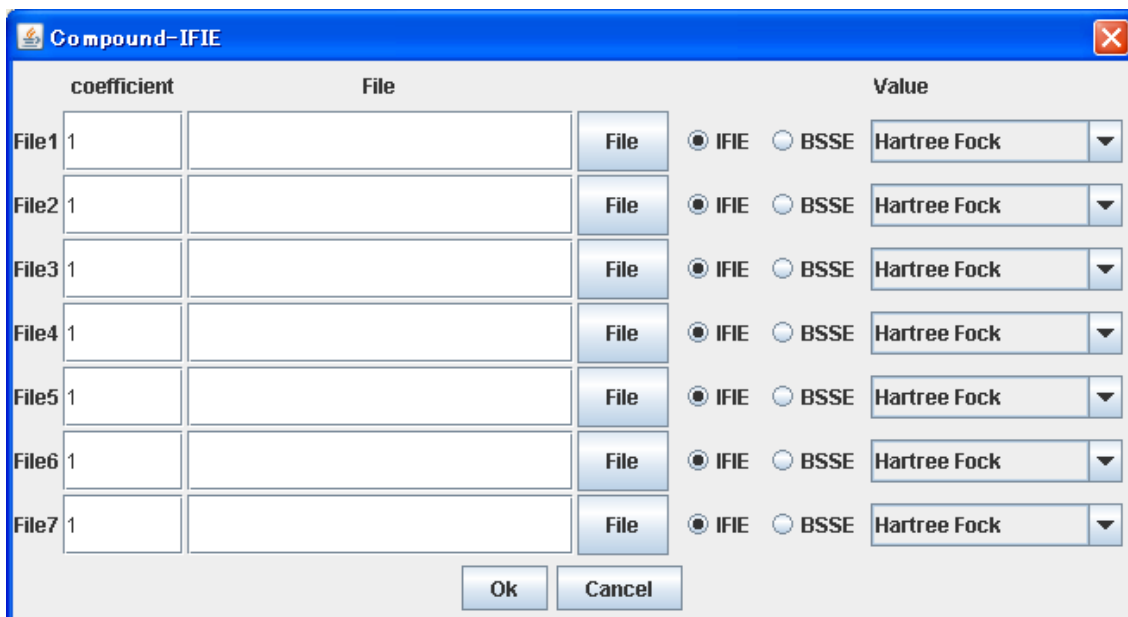


図 2.93 Value 指定(Version3 Compound)

◆ Color

◇ Auto

Color(-),Color(+)の min,max に値を指定することにより色づけの範囲が指定できます。値のスケールは、Log/Linear が指定できます。Logで 0 を指定した場合は  $1e-10$  に変更されます。

Outside the range で、”Colored”を選択すると最大値、最小値の範囲外の値は最大値、最小値の色で表示され、”None”の場合は色が付きません。

◇ Custom

指定した範囲内(min<max)の値を、指定した色で表示します。範囲外は白になります。Color のところをクリックすると色指定画面が表示されます。表示例を図 2.94 に示します。

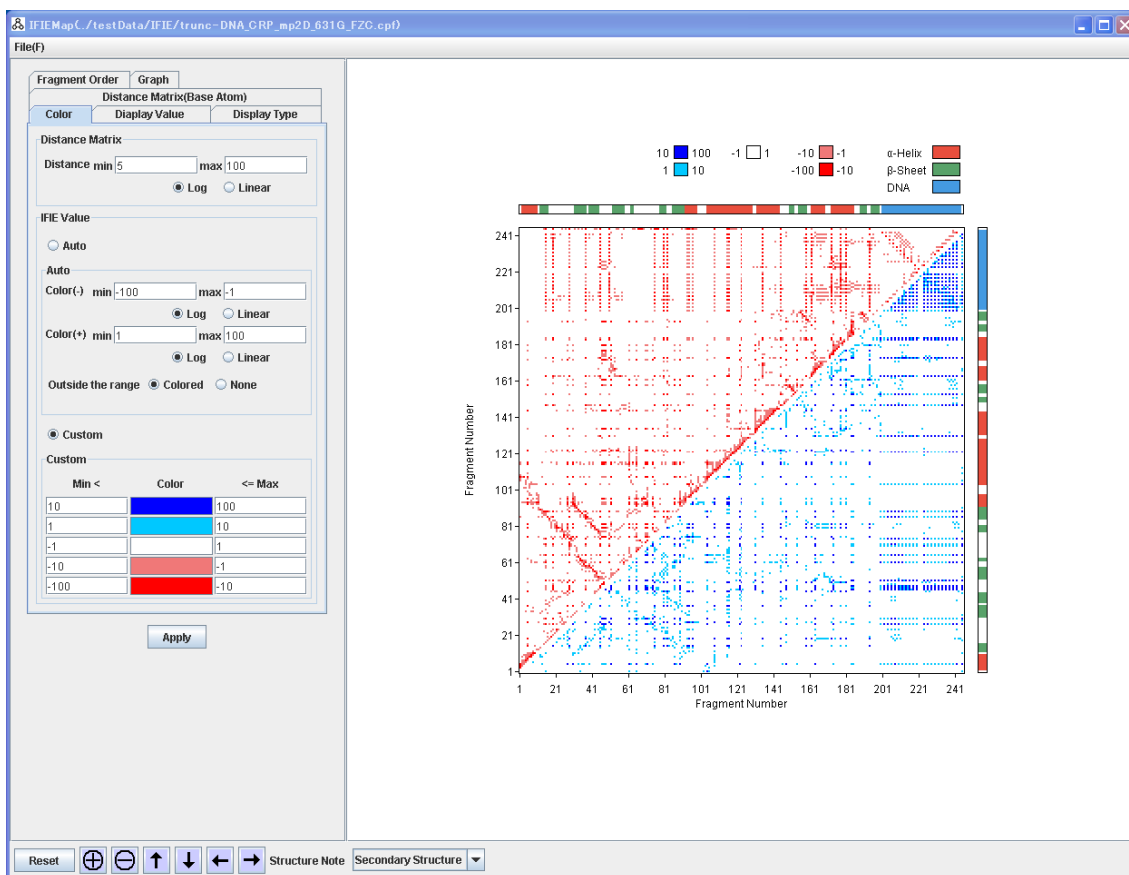


図 2.94 Costum 表示例

◆ Distance Matrix

Distance の min,max に値を指定することにより色づけの範囲が指定できます。値のスケールは、Log/Linear が指定できます。Logで 0 を指定した場合は  $1e-10$  に変更されます。

- Distance Matrix(Base atom)

残基、DNA、その他で、Distance Matrix を計算するときに、どの原子を基準にするかを指定します。

- 1) Center of mass フラグメント重心
- 2) The shortest interatomic 最短原子間距離
- 3) Custom 個別指定

CPF ファイル中の Atom Type 名を指定してください。DNA は、1DNA1フラグメントのときに、backboneまたは、baseのどちらかを基準にするか選択します。指定をしない場合は、フラグメント重心を基準とします。

others には、残基、DNA 以外のフラグメント要素の場合にどの原子を基準にするかを指定します。指定方法は “フラグメント番号:原子名” です。複数ある場合は空白で区切って、複数記述します。記述例 222:C3' 244:P

図 2.95 Distance Matrix 表示例

- Fragment Order

MAP 上のフラグメントの表示の順番を指定します。

All は、全てのフラグメントの指定で、Chain はチェーンごとの指定が可能で、チェックボックスでチェックのついているチェーンを表示します。各入力フィールドに、入力された順に表示されます。以下の指定が可能です。

- 1) 開始フラグメント番号—終了フラグメント番号:増分

指定されたフラグメントがはじめに表示されます。空白で区切り、複数範囲の記述が可能です。

example 200-220:2

## 2) 残基名指定

GLY, ASP 等の 3 文字で残基名を指定すると、その残基が表示されます。

空白で区切り、複数範囲の記述が可能です。(Allのみ有効)

### ◆ Clear fragments

指定をクリアします。

### ◆ Set Default

デフォルトの値を設定します。

### ◇ Add fragments in range

All,Chain でフラグメント番号を指定するための補助機能です。

この画面を表示中に、3D 表示で、構造をクリックするとそのフラグメント番号が No. に表示されます。フラグメントは、複数指定可能です。Å にそのフラグメントからの距離を指定して、“Add” ボタンをクリックすると、範囲内にあるフラグメントが、フラグメント指定のフィールドに追加されます。

“Center of mass” は、フラグメントの重心で比較し、“The shortest interatomic” は、最短原子間距離で比較します。

### ◇ Sort by base/backbone(DNA)

DNA の場合に、base/backbone の順にソートされ、表示されます。

### ◇ Sort by Main/Side Chain

多体計算の場合に、主鎖／側鎖の順でまとめて表示されます。

図 2.96 IFIE MAP Fragment Order 指定画面



- Graph

横軸にフラグメント番号、縦軸に IFIE の値を表示するグラフを表示します。Fragments に、フラグメント番号を指定します。複数のフラグメント番号が指定された場合は、その和を表示します。Label は、グラフ上の凡例に表示されます。IFIE の値の最大値、最小値も指定可能です。”Draw Graph”をクリックするとグラフが表示されます。表示を図 2.98 に示します。

No	Fragments	Label
#1	<input type="text"/>	#1
#2	<input type="text"/>	#2
#3	<input type="text"/>	#3
#4	<input type="text"/>	#4
#5	<input type="text"/>	#5
#6	<input type="text"/>	#6
#7	<input type="text"/>	#7
#8	<input type="text"/>	#8

Range Min  Max

図 2.97 IFIE MAP Graph 指定画面

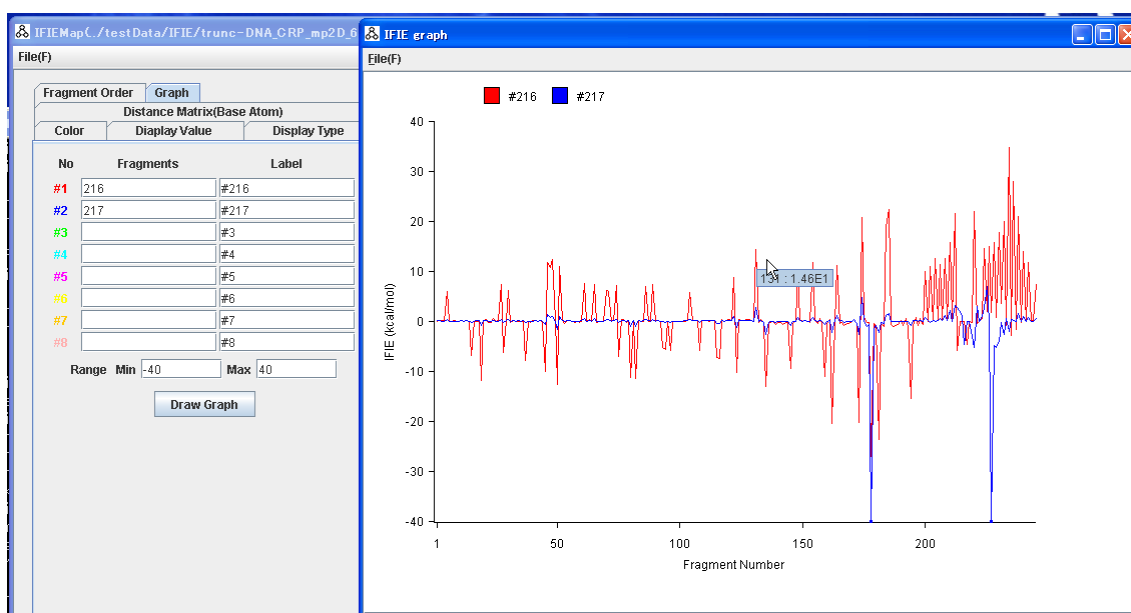


図 2.98 IFIE グラフ表示例

マウスを表示上に置き、しばらくすると、該当のフラグメント番号、エネルギーの値が表示されます。  
Fileメニューで以下の動作が可能です。

- ◆ Load CSV file  
Save CSV file で格納した形式のファイルをロードして表示します。
- ◆ Save CSV file  
CSV形式でファイルを格納します。
- ◆ Save Image  
表示を png,jpg,tiff 形式で格納します。

### 3) 操作説明

- Apply  
設定された表示形式で MAP を表示します。
- Reset  
表示を初期状態に戻します。
- 拡大、縮小、表示領域移動



ボタンをクリックすると、拡大、縮小、上下左右に表示領域が移動します。

- Structure Note  
表示の横と上に、2次構造または、チェーンを表示します。
- マウスにより拡大領域指定  
マップ表示上でマウスの左ボタンを押してドラッグするとラバーバンドが表示されボタンを離すと拡大表示されます。
- 値表示  
マウスを表示上に置き、しばらくすると、該当のフラグメント番号、エネルギーの値が表示されます。



- 対象フラグメントハイライト表示  
表示上でマウスの右ボタンをクリックすると、3D表示で該当フラグメントがハイライト表示されます。

## 2.7 FILM 等値面表示

FILM の計算結果として、フラグメントペアごとの結果ファイルを読み込み、軌道を指定して、等値面を表示します。まず計算を行った構造のファイルを読み込んでください。その後 Monitor→FILE isosurface を選択してください。表示指定画面が表示されます。

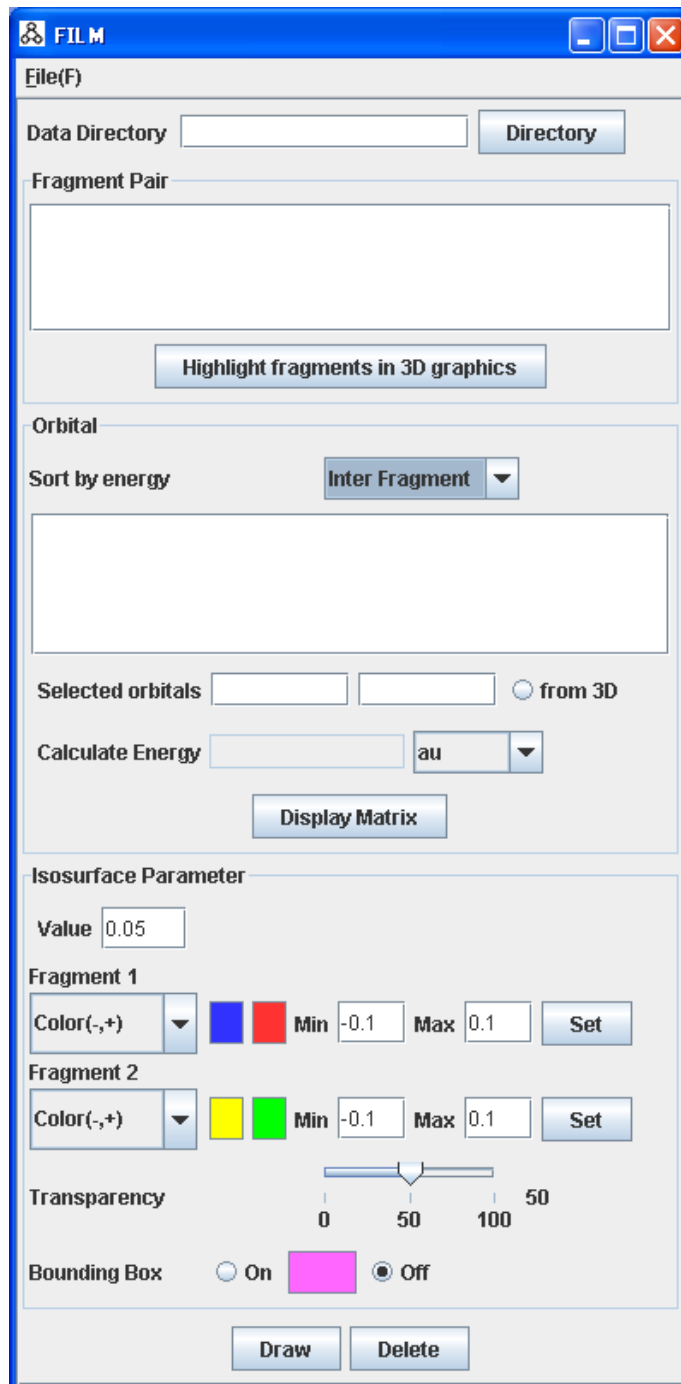


図 2.99 FILM 表示指定画面

表示指定項目を説明します。

#### 1)メニューの説明

- File メニュー

- ◆ Close

この画面を閉じます。

#### 2) 表示パラメータ

- Data Directory

結果ファイルの格納されているフォルダを指定します。結果ファイル名は、xxx\_n\_m.lmp2 です。(xxx:任意、n,m フラグメント番号)。フォルダが指定されたら、そのフォルダ配下の \*.lmp2 ファイルを読み込み **Fragment Pair** へ表示します。

- Fragment Pair

読み込み可能なフラグメントペアを表示します。選択すると、そのフラグメントペアの軌道が Orbital に表示されます。”**Highlight fragments in 3D graphics**”ボタンをクリックすると対称のフラグメントが 3D 表示でハイライト表示されます。

- Orbital

**Sort by energy** で、Inter Fragment/Inner Fragment/All/None を選択します。Inter Fragment は、フラグメント間の軌道の組でエネルギーの順にリストが表示されます。Inner Fragment は、フラグメント内の軌道の組でエネルギーの順にリストが表示されます。All は、全体での軌道の組でエネルギーの順にリストが表示されます。None は、個別に軌道を選択します。選択された軌道番号が **Selected orbitals** に表示されます。また、選択された軌道間のエネルギーの和が **Calculate Energy** に表示されます。軌道は複数選択可能です。**Selected orbitals** は、編集可能です。入力後 return キーを押すとエネルギーの値が表示されます。

**from 3D** をチェックすると、3D 表示で、原子をクリックすると、その原子が関係している軌道が、Selected orbital に表示されます。

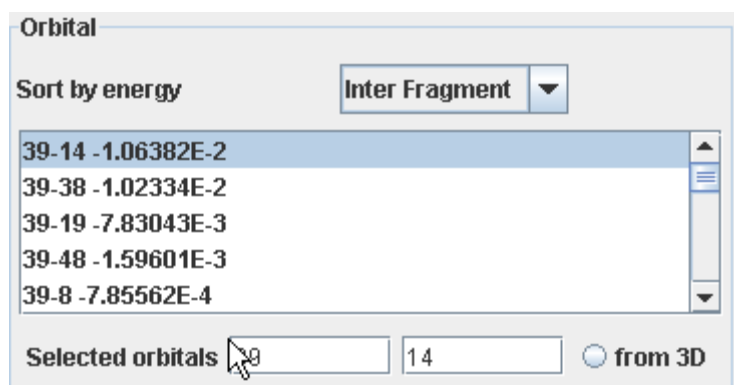


図 2.100 Inter Fragment の軌道リスト表示の例

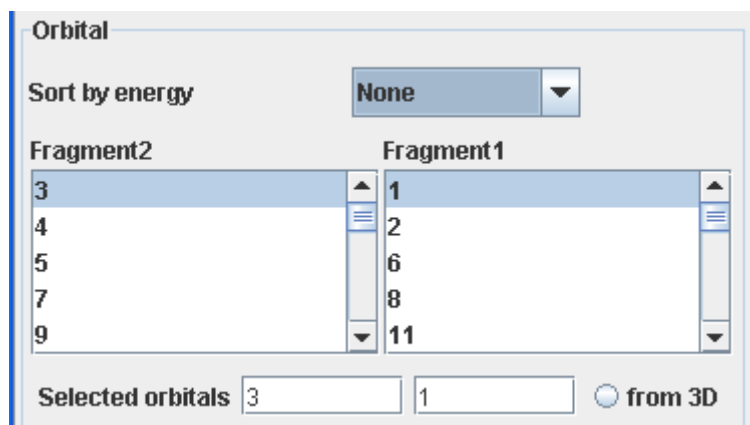


図 2.101 個別指定の軌道リスト表示の例

- Display Matrix**

軌道間のエネルギーのマトリックス表示を別ウインドウで表示します。対象フラグメント順にそのフラグメントに含まれる軌道の値を示します。値は赤→白で色付けされます。最小、最大値を変更し、**”Apply”**ボタンをクリックする色付けの範囲を変更して再描画します。マウスをマトリックス上で止めると、軌道のインデックスと値が表示されます。クリックすると対象軌道が **Selected Orbitals** に設定されます。コントロールキーを押しながら選択すると、対象軌道が追加されます。表示例を図 2.102 に示します。

表示 type は、**”Inner Fragment”**、**”Inter Fragment”**、**”All”**から選択できます。

Menu の **Save Image** を選択すると表示画面を PNG,Tiff,JPG に格納できます。

軌道リストで選択されている組を緑の枠で表示します。
- Isosurface Parameter**

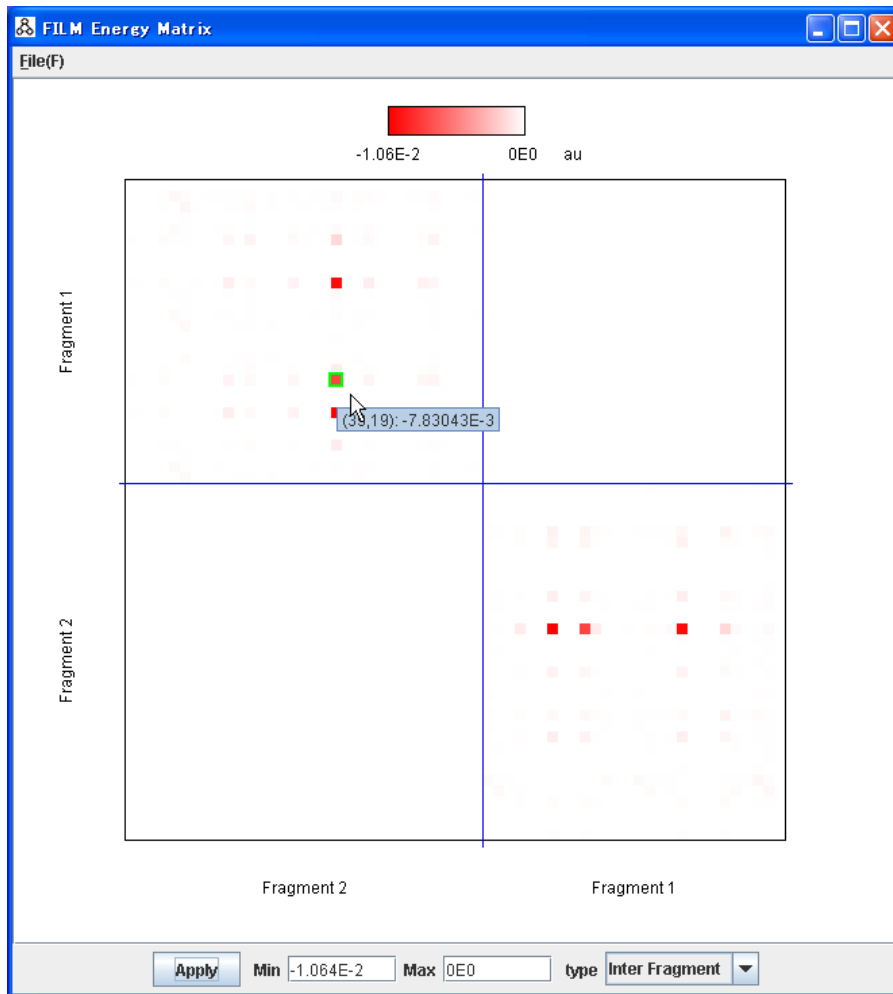
等値面の表示指定を行います。それぞれのフラグメントごとの色の指定が可能です。

複数の軌道を表示するとき位相が逆で、色が逆に表示される場合は、以下の手順で、それぞれの軌道の色を指定できます。

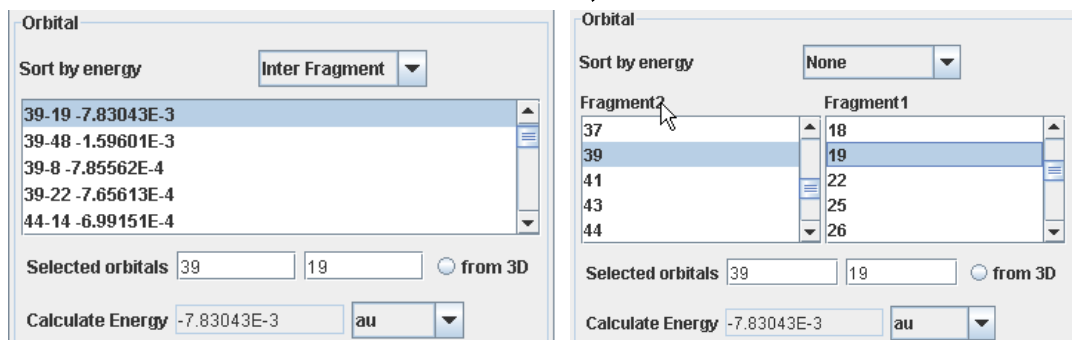
**”Set”**ボタンをクリックすると、等値面の設定が、選択されている軌道に設定されます。等値面を表示して、色が反転している場合は、表示色を反転させて(-,+),その設定を適用する **Fragment** の**”Set”**ボタンをクリックします。それぞれの軌道についてこの設定を行い、最後にまとめて表示すると所望の色で表示することが可能です。
- Draw**

等値面を表示します。選択されているすべての軌道の等値面を表示します。
- Delete**

等値面を表示から削除します。



a) マトリクス表示(39,19)をクリック



b) MAP で選択された軌道がリストでも選択される

図 2.102 マトリクス表示例

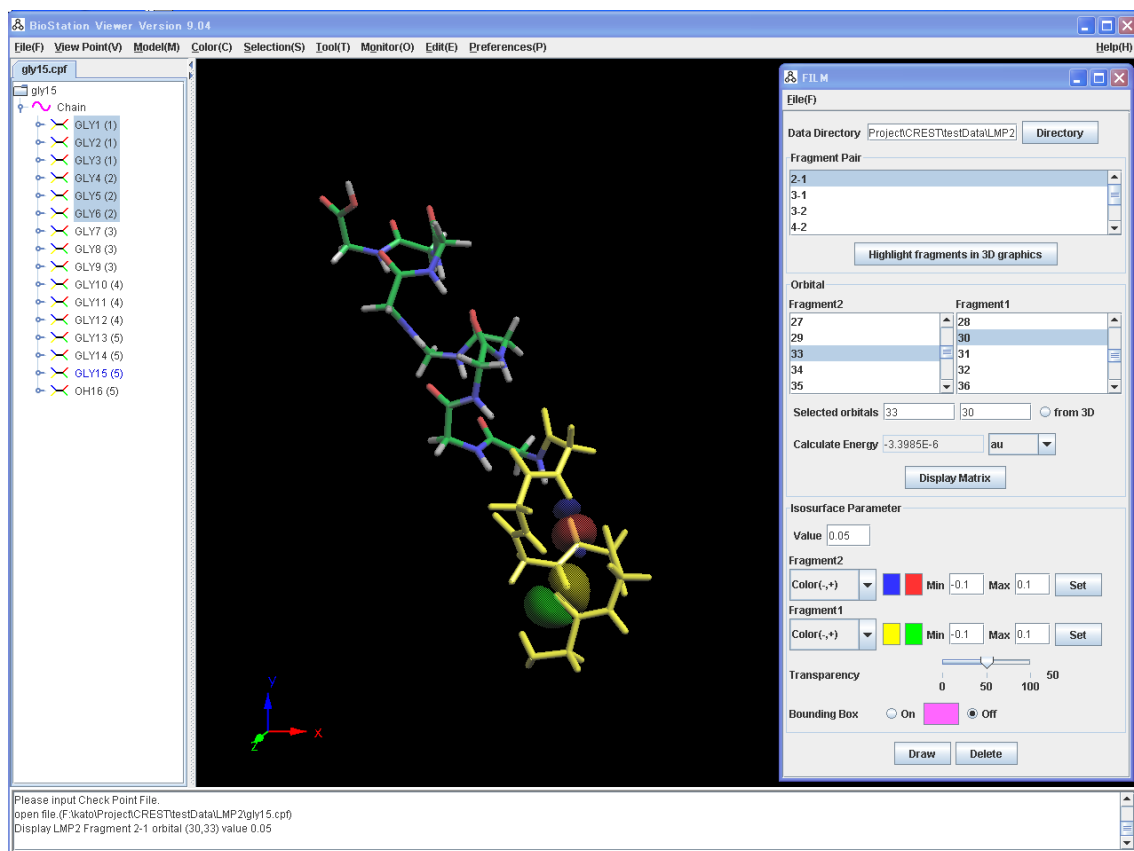


图 2.103 FILM 等值面表示例

## 2.8 ABINIT-MP 入力ファイル作成

File→Edit ABINIT-MP Input File を選択すると ABINIT-MP 入力ファイル編集画面が表示されます。ABINIT-MP Open 1.0 rev.10 の ABINIT-MP に対応した入力ファイルの編集を行えます。入力ファイルのネームリストの名称がタブになっており、各項目の指定値を入力します。CNTL,FMOCTRL,SCF,BASIS が、FMO 計算の主なパラメータで、その他は必要に応じて設定してください。ABINIT-MP 入力ファイル編集画面を図 2.104 に示します。

Control タブの Read Geometry File に表示している構造のファイル名がデフォルトで設定されますが、実行時には、必要に応じて、計算サーバ上でのパスに変更してください。

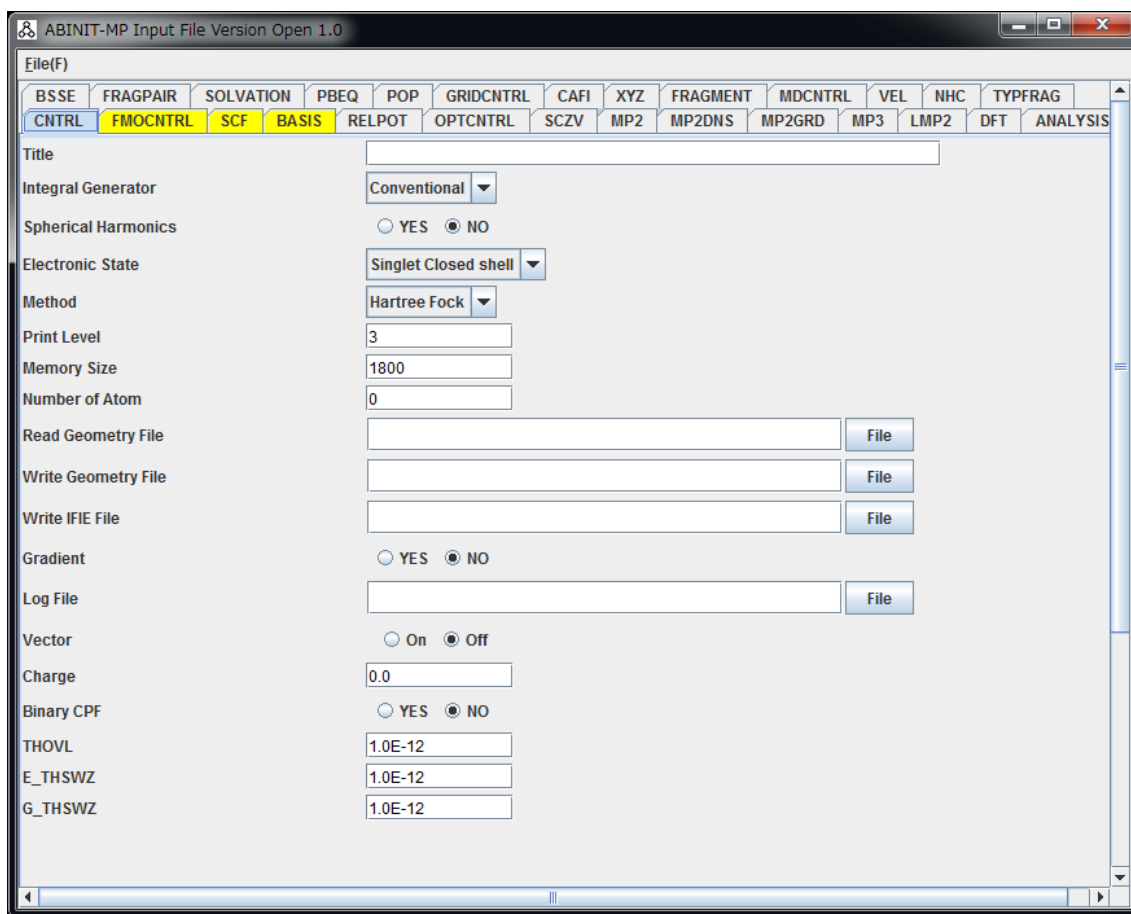


図 2.104 ABINIT-MP 入力ファイル編集画面

各項目の詳細は別ファイル ABINIT-MP プログラム説明書を参照してください。ここでは、File メニューと、3D 表示と連携機能のある、フラグメント編集機能 (FMOCTRL)、フラグメントペア指定 (FRAGPAIR) について説明します。

### 2.8.1 File メニュー

入力ファイルに関するオペレーションを File メニューで行います。



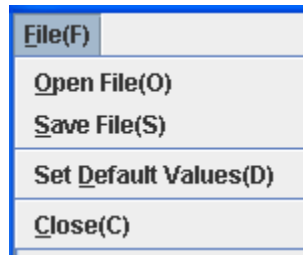


図 2.105 ABINIT-MP 入力ファイル編集画面 File メニュー

- 1) Open File  
読み込む入力ファイルを指定します。
- 2) Save File  
格納する入力ファイルを指定します。
- 3) Set Defaults Value  
入力フィールドにデフォルト値を設定します。
- 4) Close  
入力画面を閉じます。

### 2.8.2 フラグメント編集機能(FMOCNTRL)

FMOCNTRL タブを選択するとフラグメント指定に関するパラメータの入力画面が表示されます。**Auto Fragmentation** は、フラグメント分割方法の指定で **On/Off/Hybrid** の 3 つのモードがあります。

- 1) On 自動分割でフラグメントを生成します。必要なパラメータを指定します。
- 2) Off フラグメントを自動分割後、フラグメントを手動で分割指定します。AJF ファイルには、フラグメント分割のすべての情報が出力されます。
- 3) Hybrid フラグメントを自動分割後、フラグメントを手動で分割指定します。AJF ファイルには、自動フラグメント分割後に、修正したフラグメントの情報が出力されます。手動で分割しその分だけ確認したい場合は、こちらが便利です。

”On”選択時 の画面を図 2.106 に、“off” または、“hybrid”を選択時の画面を図 2.107 に示します。“Set Fragmentation” ボタンをクリックするとフラグメント編集画面が表示されます。

hybrid を使用した編集の例をチュートリアル 4.4、0 節に説明します。

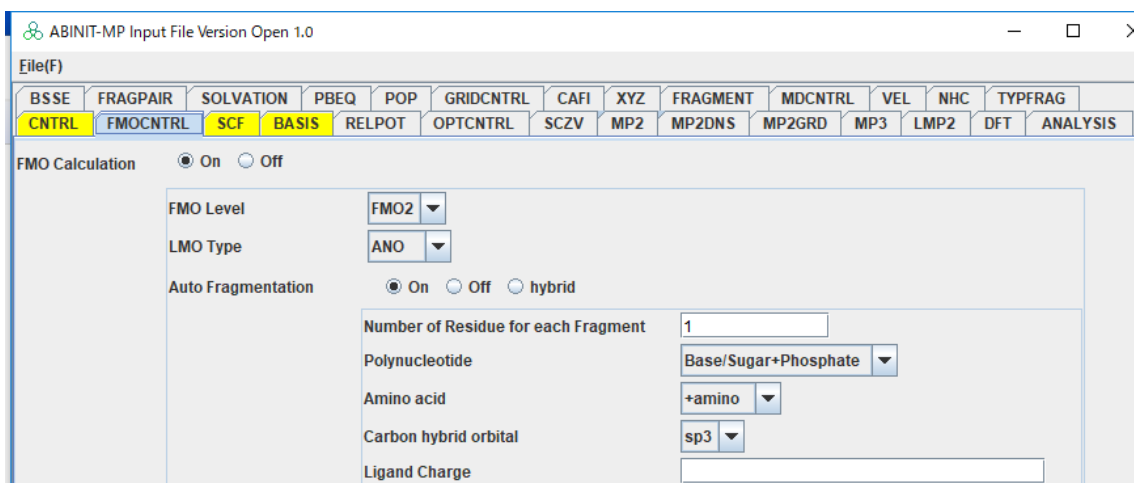


図 2.106 Auto Fragmentation の“on”選択時

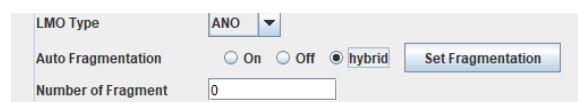


図 2.107 Auto Fragmentation の”Off”/”hybrid”選択時

フラグメント編集画面は、上部に、フラグメントの情報、下部に編集の4つのタブで構成されます。画面を図 2.108 に示します。

#### a) フラグメントの情報

フラグメントの情報として、フラグメント番号、形式電荷、そのフラグメントに結合電子割り当てたフラグメント間の結合本数、フラグメント境界の BDA-Connected Atom、フラグメントを構成する原子の番号、Molecular Weight を表示します。フラグメント番号は、ボタンになっていて、クリックすると該当フラグメントが、3D 表示でハイライト表示されます。形式電荷は、ここで編集可能です。

“Display All Information”は、Yes の場合はすべてのフラグメント情報を表実し。”No”の場合は、編集されたものと HybridFrag に指定されたフラグメントのみ表示します(分子構造も)。HybridFrag 指定後、”Apply”ボタンをクリックすると、指定されたフラグメントのみの表示に代わります。編集されたフラグメントは、左端に”\*”を表示します。HybridFrag に指定された番号は自動分割時のフラグメント番号です。

“Fragment Position by sort”は、Hybrid の場合の編集されたフラグメントの挿入方法を指定します。”YES”の場合は、フラグメントに含まれる水素以外の原子番号により、挿入位置を決定します。”NO”の場合は、自動生成されるフラグメントの最後に追加します。

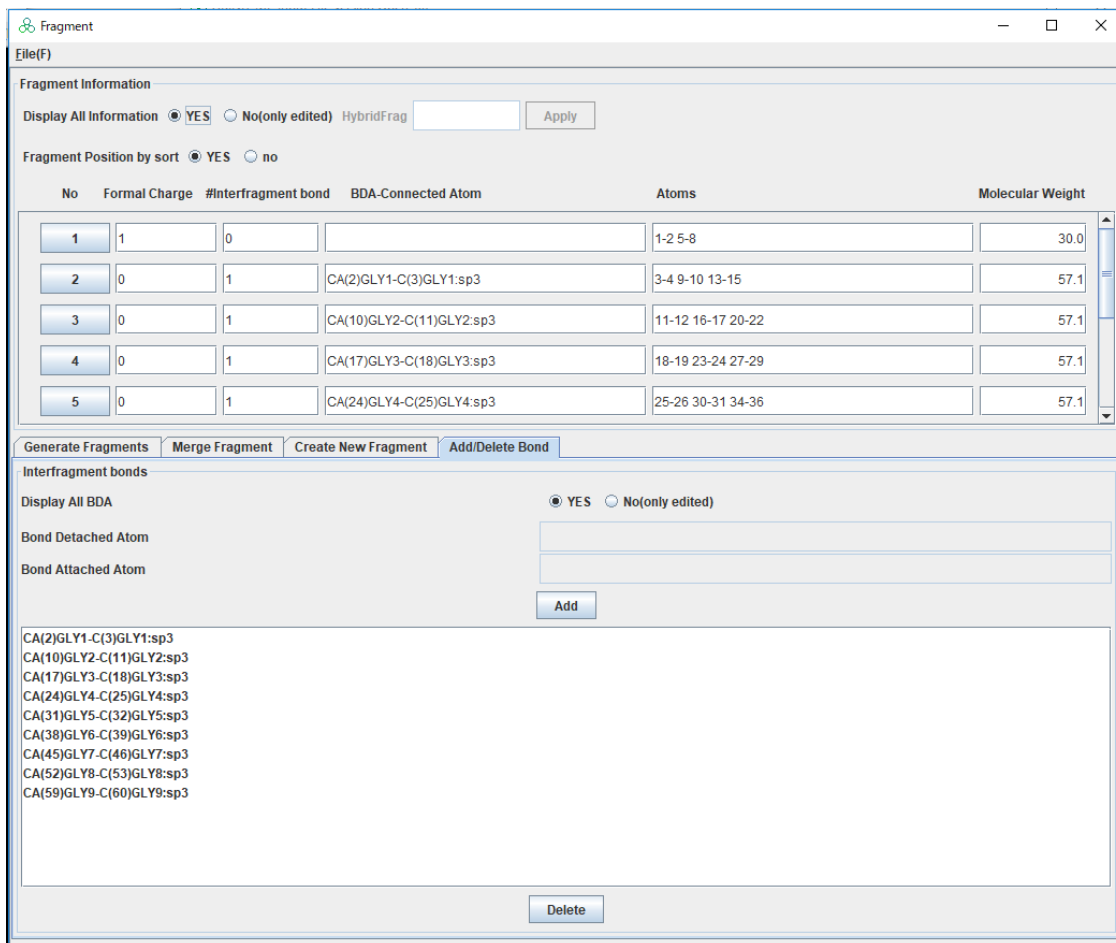


図 2.108 フラグメント編集画面

## b) 編集機能

Generate Fragments/Merge Fragment/Create New Fragment/Add/Delete Bond の4つの機能がタブに分かれて指定できます。それぞれのフラグメント指定は、3D 表示または、Tree 表示の原子をクリックすることにより、その原子のフラグメント番号または、原子番号が指定画面に設定されます。原子指定では、入力フィールドをクリアしないと、追加されていきます。

### (1) Generate Fragments

タンパク質の自動分割を行う場合は、“Auto”を、分割する原子を個別指定し自動分割を行う場合( dendrimer 等)は、“Manual”を、結晶系の分子の自動分割は“Crystal”を選択してください。

#### 1) タンパク質の自動分割(Auto)

パラメータを指定し、“Generate Fragment”ボタンをクリックすると、自動フラグメント分割を行い結果を表示します。フラグメント間の結合部分で電荷の受け渡しがある部分は、楕円球で表示され、小さい球が結合電子をあらわしています。Add/Delete Bond タブに、形式電荷 (Formal Charge)、結合電子を自分のフラグメントに割り当てたフラグメント間の結合本数 (#Interfragment)が自動的に計算され表示されます。表示例を図 2.109 に示します。

パラメータ

**Number of Residue for each Fragment** 1残基あたりのフラグメント数

**Polynucleotide** スクレオチドを分割する場合に、塩基をフラグメントに分割するかどうかを指定する。

Base+Suger+Phosphate：塩基をフラグメントに分割しない。

Base/Suger+Phosphate：塩基をフラグメントに分割する。

Base/Suger/Phosphate：塩基、リン酸をフラグメントに分割する。

**Amino acid** 自動フラグメント分割でアミノ酸を分割する場合に、側鎖でフラグメントに分割するかどうかを指定する。

+amino：側鎖をフラグメントに分割しない。

/amino：側鎖をフラグメントに分割する。

+peptide：主鎖をペプチド結合で分割する。

-peptide：主鎖をペプチド結合で分割し、かつ側鎖を分割する。

**Carbone hybrid orbital** 自動フラグメント分割で炭素鎖をする場合に、位置の結合での炭素混成軌道を指定する。

sp3: sp3: -C-C-結合で分割する。

sp2: sp2: -C=C-結合で分割する。

**Rsolve** イオンが周囲のフラグメントとマージされる際の距離(Å)の閾値

**Ligand Charge** フラグメントごとにチャージを指定する

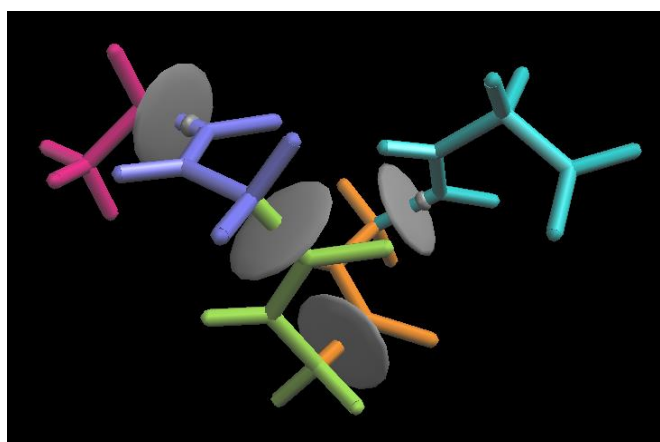
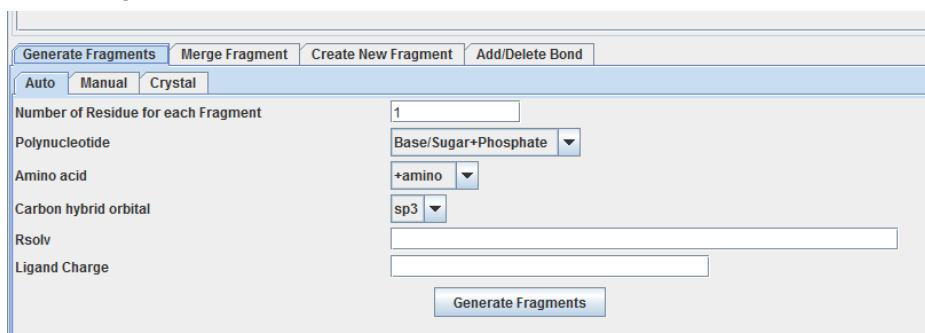


図 2.109 Gly5 を自動分割した結果 (フラグメントで色づけ)

## 2) 分割する原子を個別指定し自動分割(Manual)

Start→Nextの方向に原子を探索していき、Startと同じ原子名のところで、分割します。

3D表示で、自動分割の開始点となる原子をクリックして、分割方向のその隣となる原子をクリックします。原子名が”**Start Atom**”、”**Next Atom**”に表示されます。”**BDA**”は、分割点で、どちらに電子を割り当てるかを指定します。”**Interval**”は、Startと同じ原子名が見つかったときに、何個おきに分割点を設定するかを指定します。複数の分割方向がある場合は、”**Add**”ボタンをクリックして、指定を追加してください。”**Delete**”ボタンをクリックすると表示されている指定が削除されます。Si<sub>12</sub>H<sub>26</sub> の指定例を図 2.110 に、分割後の表示例を図 2.111 に示します。Si<sub>12</sub>H<sub>26</sub> は、デフォルトの接続チェックでは、ボンドが認識できないので、メニューの Preferences→Set Preference→Connect Atom の Scale を a.3 にして、”Apply”ボタンをクリックしてください。

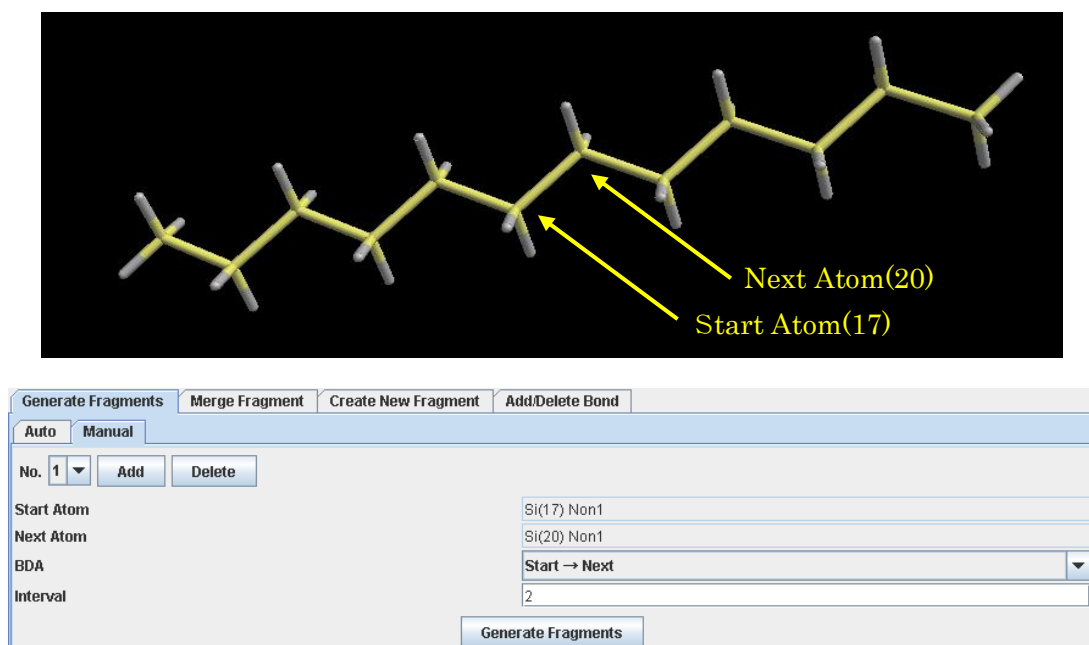


図 2.110 個別指定の自動分割指定例

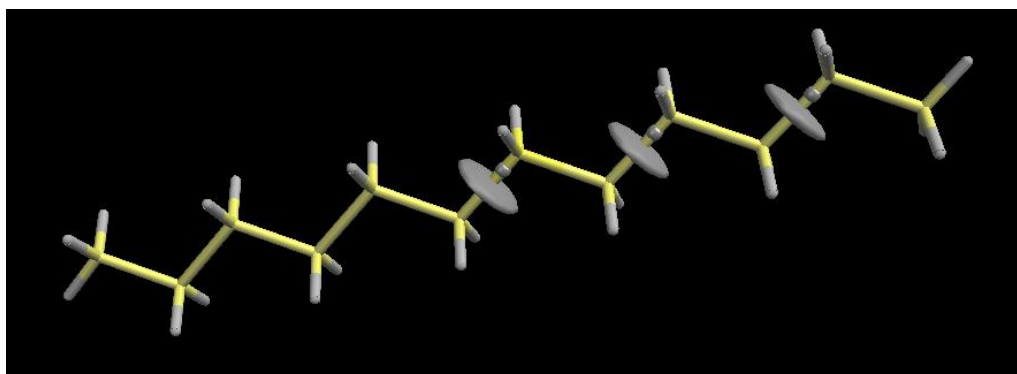


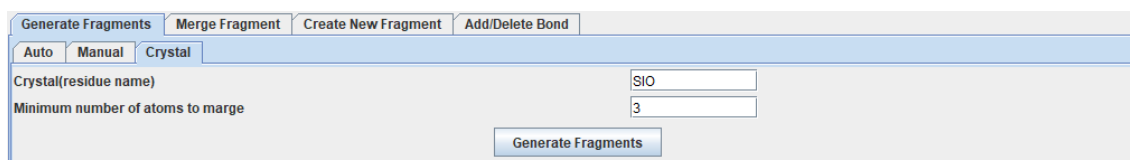
図 2.111 Si<sub>12</sub> を自動分割した結果

### 3) 結晶系の分子の自動分割(Crystal)

パラメータを指定し、“**Generate Fragment**”ボタンをクリックすると、自動フラグメント分割を行い、結果を表示します。

**Crystal(residue name)** pdb ファイル中の結晶部分を残基名で指定する。残記名は英数字記号(空白を含む)3文字で指定する。残基のグループ分けに使用。

**Minimum atoms to merge** Detail Fragmentation で指定されたフラグメント分割を行った際、ここで指定した数より少ない原子のフラグメントは自動的にマージされる。



The screenshot shows a dialog box titled "Generate Fragments" with several tabs: "Auto", "Manual", and "Crystal". The "Crystal" tab is selected. Inside the dialog, there are two input fields: "Crystal(residue name)" with the value "SIO" and "Minimum number of atoms to merge" with the value "3". A "Generate Fragments" button is located at the bottom center of the dialog.

図 2.112 結晶系の分子の自動分割の指定例

SiO<sub>2</sub> を 5x5x2 配置した分子+ペプチドをフラグメント分割する例を以下に示します。

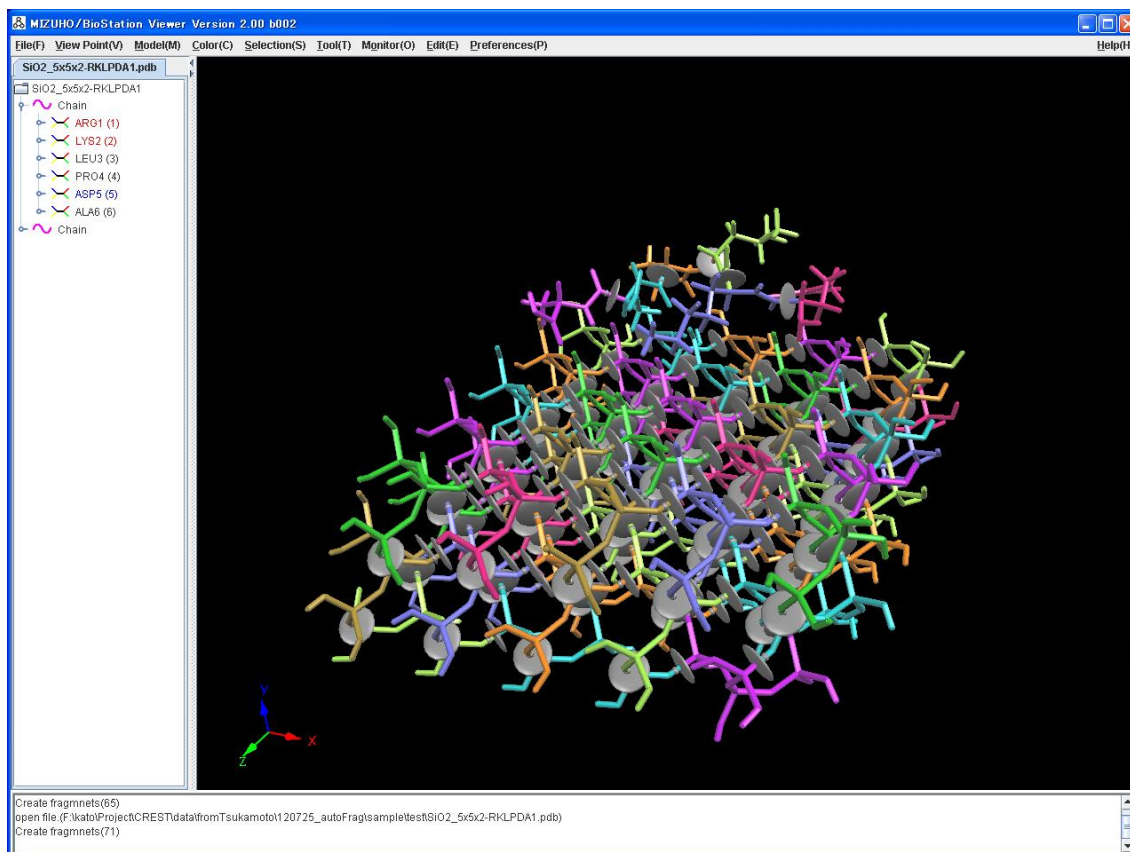
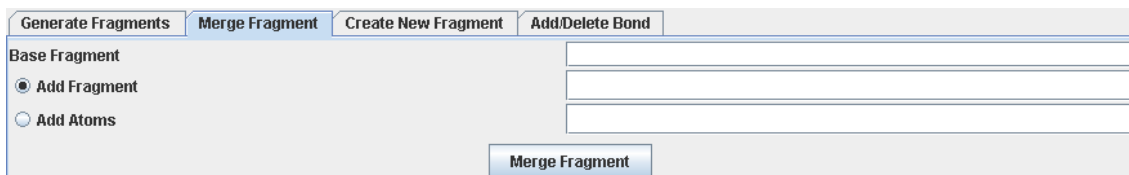


図 2.113 SiO<sub>2</sub> を 5x5x2 配置した分子+ペプチドの自動分割指定と結果

## (2) Merge Fragment

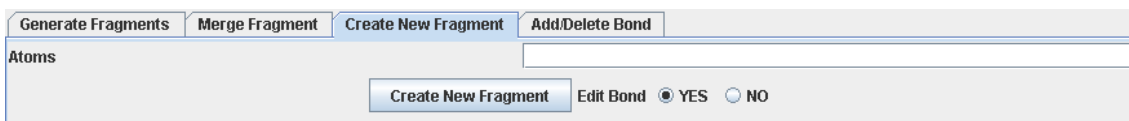
Base Fragment に指定されたフラグメントに、フラグメントまたは原子をマージします。Base Fragment の入力フィールドをクリアすると、3D 表示または、Tree 表示で、クリックされた原子のフラグメント番号が設定されます。ラジオボタンで選択されているほうにクリックされた原子のフラグメント番号または、原子番号が設定されます。



The screenshot shows a software interface with four tabs: 'Generate Fragments', 'Merge Fragment', 'Create New Fragment', and 'Add/Delete Bond'. The 'Merge Fragment' tab is selected. Below the tabs, there is a 'Base Fragment' label followed by an empty text input field. Underneath, there are two radio buttons: 'Add Fragment' (which is selected) and 'Add Atoms'. At the bottom of the dialog, there is a 'Merge Fragment' button.

## (3) New Fragment

指定された原子で、新しいフラグメントを作成します。**Edit Bond** を **YES** にすると、**Create New Fragment** クリック後、次の **Add/Delete Bond** タブが表示されます。ここで、作成したフラグメントの相手フラグメントが作成されている場合は、**YES** にして、**BDA** の設定を行ってください。リガンドのフラグメント等新しくフラグメントを作成する場合は、**Edit Bond** を **NO** にしておき、全てのフラグメントを作成してから **BDA** の設定を行ってください。

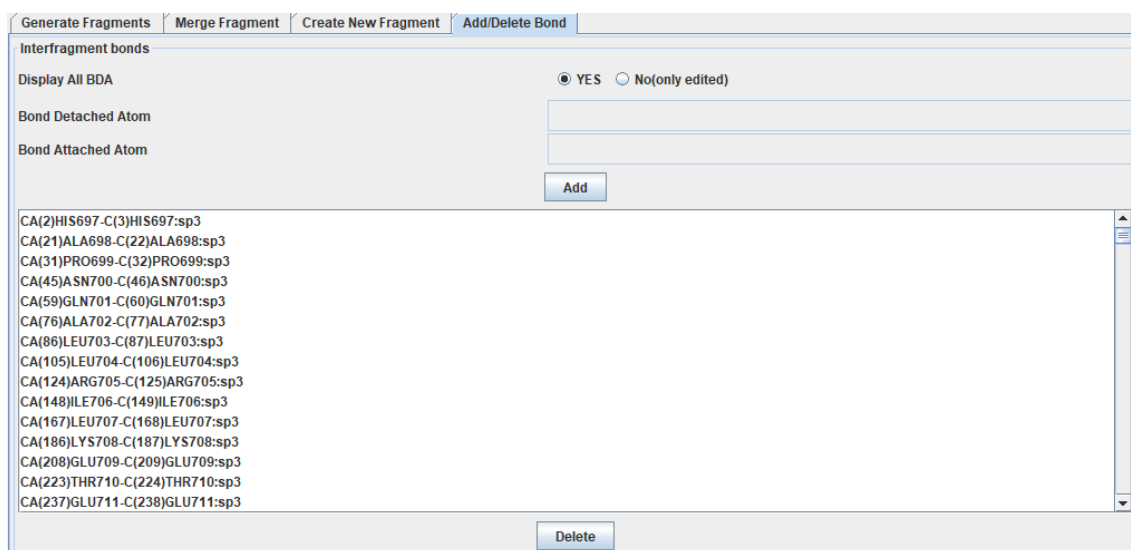


The screenshot shows a software interface with four tabs: 'Generate Fragments', 'Merge Fragment', 'Create New Fragment', and 'Add/Delete Bond'. The 'Create New Fragment' tab is selected. Below the tabs, there is an 'Atoms' label followed by an empty text input field. At the bottom of the dialog, there is a 'Create New Fragment' button and a group of radio buttons labeled 'Edit Bond' with 'YES' (selected) and 'NO' options.

## (4) Add/Delete Bond

フラグメント間の結合を指定します。“Display All Information”は、Yes の場合はすべての **BDA** 情報を表示し。”No”の場合は、編集された **BDA** 情報のみを表示します。フラグメント間で、**BDA**(Bond detached Atom)がある場合、2つの原子をクリックして、“**Add**”ボタンをクリックすると結合が追加されます。形式電荷は **Bond Detached Atom** から **Connected Atom** へ割り当てられます。

3D 表示の結合か、結合のリストを選択し、“Delete”をクリックすると結合が削除されます。必要に応じて形式電荷(Formal Charge)を編集してください。



注意！！

- フラグメント間で接続があり、BDA が指定されていない場合は、パラメータファイル出力時にエラーになりますので、必ず指定してください。エラーがある場合は下記のメッセージが表示されます。

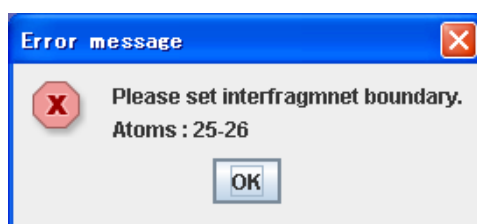


図 2.114 結合が指定されていない場合のエラー表示

- フラグメント編集画面を閉じると、3D の結合表示が消えます。



### 2.8.3 フラグメントペア指定 (FRAGPAIR)

BSSE 計算で使用する、フラグメントペアを指定します。指定画面を図 2.115 に示します。

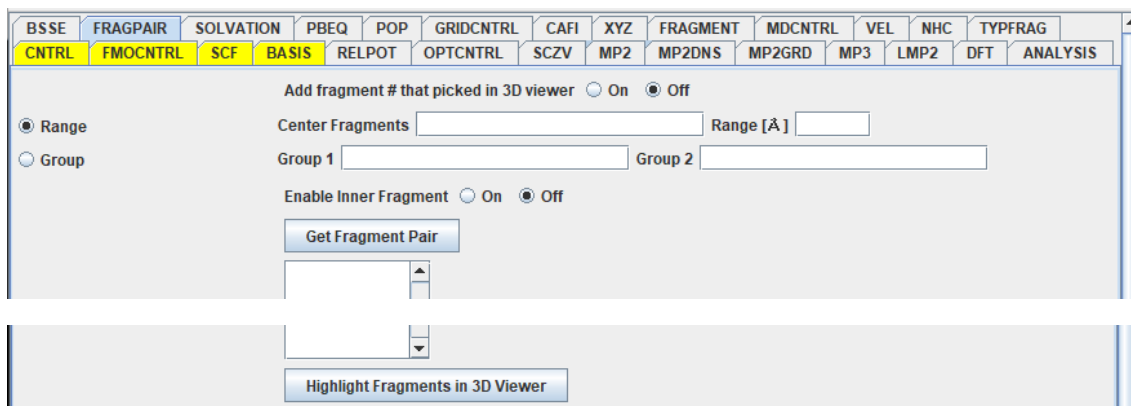


図 2.115 フラグメントペア指定画面

- 1) Add fragment # that picked in 3D viewer  
3D 表示でフラグメントをクリックしたときにその番号を、カーソルのあるテキストエリアへ表示する場合は、**On** を選択してください。
- 2) Range  
指定された範囲内にあるフラグメント同士のペアをリストに表示します。
- 3) Group  
Group1、Group2 に指定されたフラグメント間のペアをリストに表示します。**Enable Inner Fragment** を **On** にすると、Group 内のフラグメント間もペアの対象とします。
- 4) Get Fragment Pair  
上記で指定されたフラグメントペアのリストを **Fragment Pair List** へ表示します。
- 5) Fragment Pair List  
フラグメントペアのリストの表示。入力ファイルへは、このフィールドの内容が出力されます。手で編集することも可能です。
- 6) Highlight Fragments in 3D Viewer  
指定されたフラグメントペアを 3D 表示でハイライト表示します。

## 2.9 基本動作

### 2.9.1 表示の拡大、縮小、回転、移動

表示された図は拡大、縮小、回転、移動が可能です。各動作のオペレーションを表 2.1 に示します。

表 2.1 拡大、縮小、回転、移動のオペレーション(windows2 つボタン)

動作	オペレーション
拡大	Alt キーを押しながらマウスの左ボタンを押し、下の方向へマウスポインターを移動させる。
縮小	Alt キーを押しながらマウスの左ボタンを押し、上の方向へマウスポインターを移動させる。
回転	マウスの左ボタンを押し回転させたい方向へマウスポインターを移動させる。
移動	マウスの右ボタンを押し移動させたい方向へマウスポインターを移動させる。

### 2.9.2 分子構造の座標の回転、移動

ファイルごとに分子構造の座標の回転、移動がキーボードからの入力により可能です。このオペレーションでは、対象のファイルの分子構造の座標そのものが変更され、分子構造の編集に使用できます。

移動中心点に右のような移動方向を示すマークを表示します。キーバインドは、

移動 x 方向(-:z+:x)、y 方向(-:c+:v)、z 方向(-:b+:n)

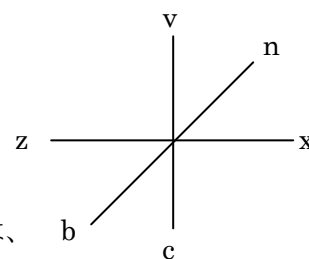
回転 x 軸(-:a+:s)、y 軸(-:d+:f)、z 軸(-:g+:h)

です。回転、移動すると、その原子の座標も変化します。

移動は、キーを押すごとに 1.0 Å 移動し、シフトキーを押しながらの場合は 0.5 Å、コントロールキーを押しながらの場合は 0.1 Å 移動します。回転は、キーを押すごとに 45° 回転し、シフトキーを押しながらの場合は 5°、コントロールキーを押しながらの場合は 1° 回転します。

回転、移動の中心はファイル入力時は、そのファイルの原子全体の重心です。特定の原子の座標を回転中心とすることができます。中心とする原子をクリックして Tool メニュー Set File Rotation Center を選択すると、クリックされた原子の位置が移動中心となります。

何も選択されていない状態で Tool メニューの Set File Rotation Center を選択すると、ファイルごとの重心に中心を再設定します。

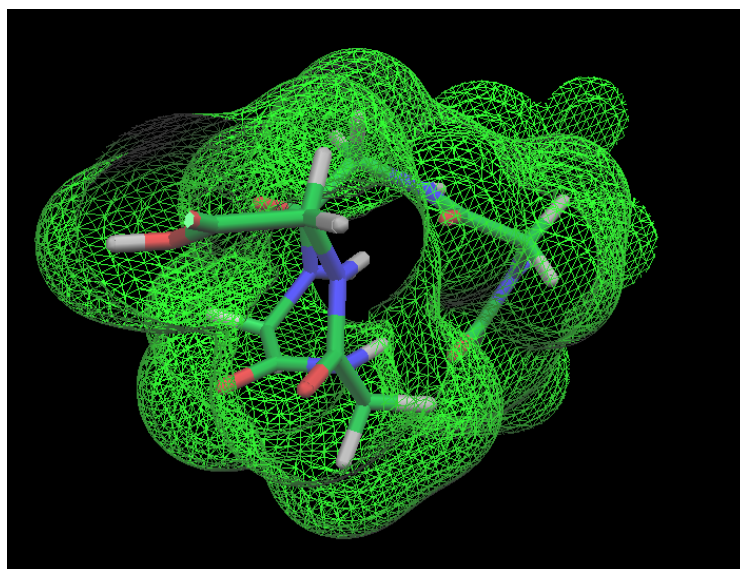
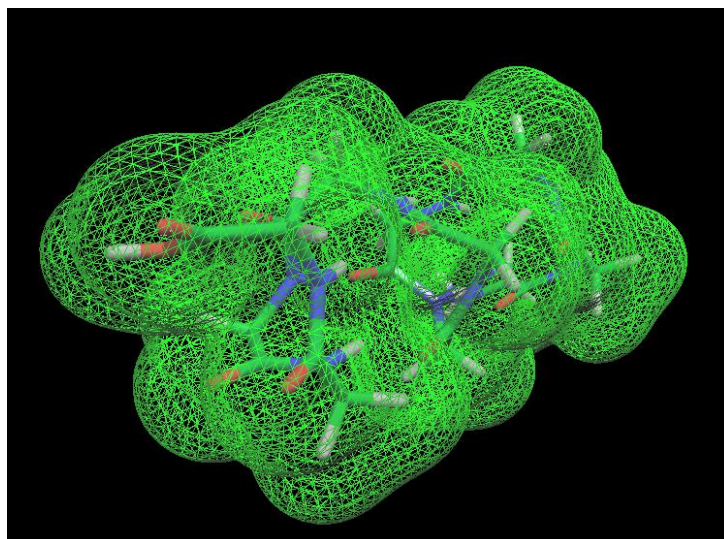


### 2.9.3 可視化領域の制御

マウスホイールで、表示前後のクリップ距離を制御し、クリップ範囲外は表示しないようにして、可視化領域を制限することが可能です。表示例を図 2.116 に示します。オペレーションは、マウスホイールの移動量により、表示前後のクリップ距離を制御し表示領域を制御します。これにより、指定

範囲外が表示されなくなり、対象分子のみの表示が可能となります。ただホイールを回したときは、前の領域をクリップし、シフトキーを押しながらホイールを回したときは、後ろの領域をクリップする。

コントロールキーを押しながらホイールを回したときはクリップ量を  $\times 0.1$  にします。Alt を押しながらホイールを回した場合はクリップをリセットします。



上:標準の表示、下:前後をクリップ

図 2.116 分子の可視化領域の制御例

## 2.10 対象選択方法

3D表示上で、分子構造をクリックするとクリックされた原子の情報がメッセージエリアに表示され、対象の構造が黄色で表示され、Tree 図で強調表示されます。一つの対象をクリックし、シフトを押しながら別の対象をクリックするとその間の項目も選択されます。コントロールキーを押しながらクリックするとクリックされた対象が追加で選択されます。表示例を図 2.117 に示します。

Tree 図の残基名、原子名をクリックする事により対象の選択が可能です。選択された対象は 3D 表示上で黄色で表示されます。一つの対象をクリックし、シフトを押しながら別の対象をクリックするとその間の項目も選択されます。コントロールキーを押しながらクリックするとクリックされた対象が追加で選択されます。

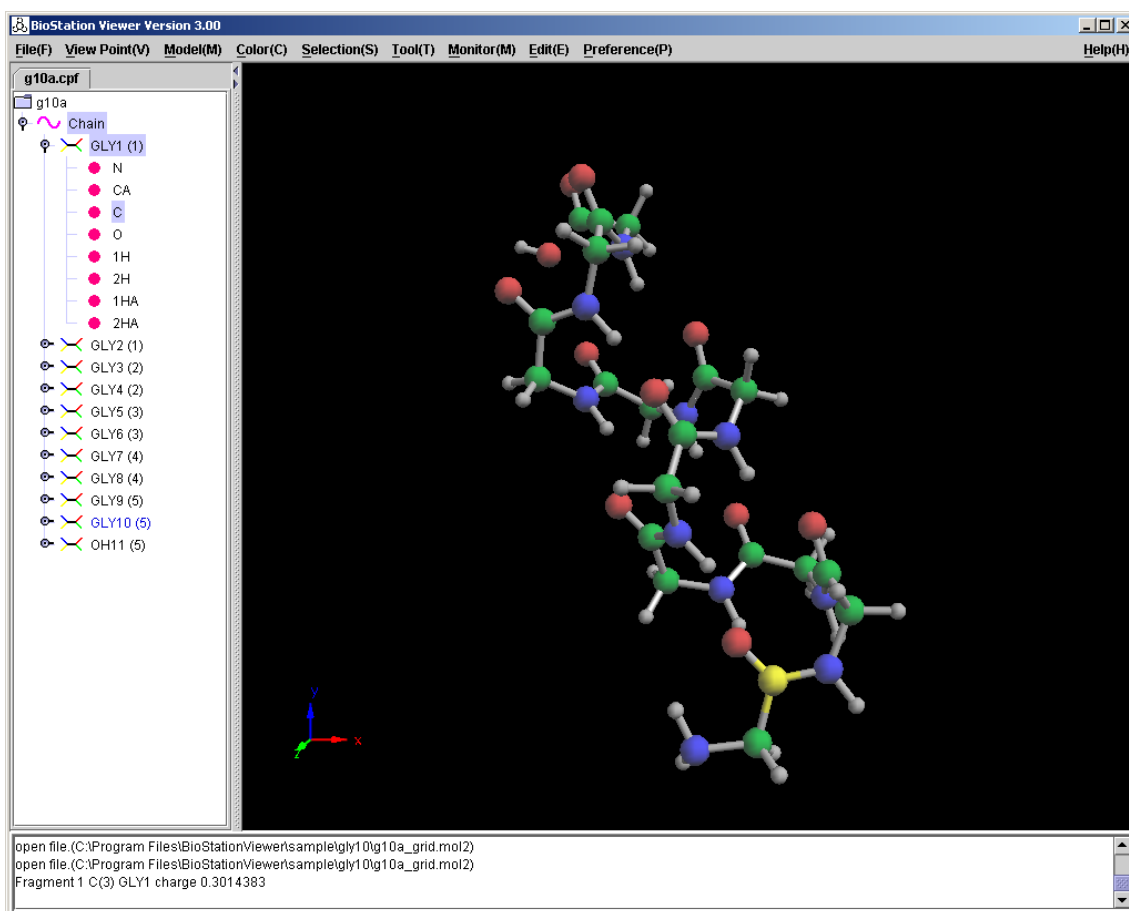


図 2.117 原子選択の例

## 2.11 表示形式等の指定

右ボタンで表示対象をクリックした場合はその対象の、表示有無、表示形式、色、ラベル表示指定の画面がポップアップし各種指定がおこなえます。原子の指定画面を図 2.118 に、残基の指定画面を図 2.119 示します。指定対象は、Tree 図の項目を左ボタンでクリックして選択し、右ボタンでクリックする事により指定画面を表示する事もできます。Atom/Structure 両方に指定は適用されます。

**Display**: 表示の有無を指定します。

**Model**: 残基の場合、表示形式を None、Wire Frame、Wire Frame with Fragment Bond、Ball&Stick、Stick、Ball&Wire、CPK より選択します。None の場合は、全体の指定が有効となります。

**Label**: ラベルの表示を指定します。原子の場合は名称と番号の選択が、残基の場合は名称と原子番号付の名称が選択できます。

**Color**: 表示色を、None、Atom、Residue、Charged Residue、Atom Charge、Fragment Charge、Residue Charge、Fragment、Interaction Energy、Interaction Energy[lock]、Chain、File、Other より選択します。None の場合は、全体の指定が有効となります。Other の場合の設定色を横に表示します。そこをクリックすることによりカラー選択画面が表示されます。

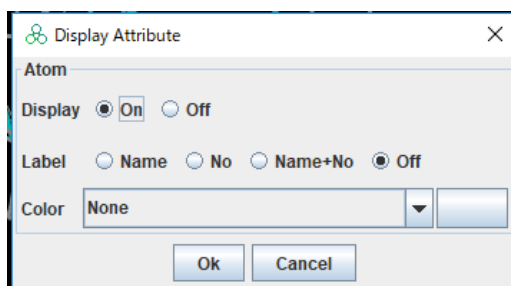


図 2.118 原子表示指定の画面

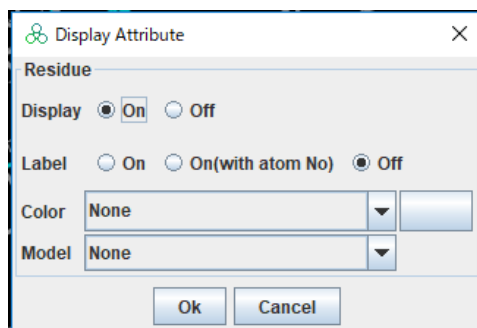


図 2.119 残基表示指定の画面

## 2.12 解析領域表示指定

MOL2 ファイルを使用して解析領域を表示することができます。書式は@<TRIPOS>ATOM の前の行に”grid file”と記述して、頂点の座標を適当な原子で記述し、@<TRIPOS>BOND で表示したい線をインデックスで指定します。以下に表示例とファイル例を示します。解析領域の色は、ファイルの順の色になります。

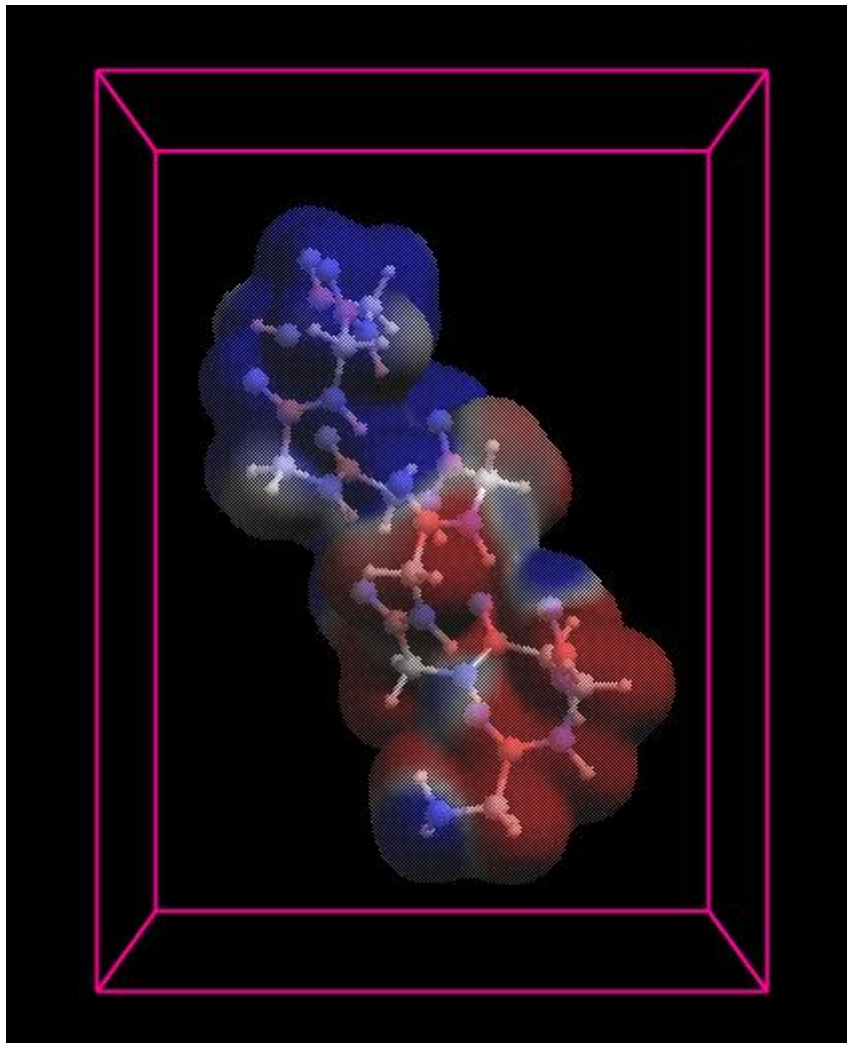


図 2.120 解析領域表示指定例

```

@<TRIPOS>MOLECULE
test data
  8  12  0
  0  0  0  0

grid file
@<TRIPOS>ATOM
  1 N   -8.0000  -4.0000  -9.0000 N.4   1 GLY   0.0000
  2 N    8.0000  -4.0000  -9.0000 N.4   1 GLY   0.0000
  3 N   -8.0000  -4.0000   4.0000 N.4   1 GLY   0.0000
  4 N    8.0000  -4.0000   4.0000 N.4   1 GLY   0.0000
  5 N   -8.0000  18.0000  -9.0000 N.4   1 GLY   0.0000
  6 N    8.0000  18.0000  -9.0000 N.4   1 GLY   0.0000
  7 N   -8.0000  18.0000   4.0000 N.4   1 GLY   0.0000
  8 N    8.0000  18.0000   4.0000 N.4   1 GLY   0.0000
@<TRIPOS>BOND
  1      1      2  1
  2      2      4  1
  3      3      4  1
  4      3      1  1
  5      5      6  1
  6      6      8  1
  7      7      8  1
  8      7      5  1
  9      1      5  1
 10     2      6  1
 11     3      7  1
 12     4      8  1

```

図 2.121 解析領域表示指定ファイル例(g10a\_grid.mol2)

## 2.13 Molda

Molda 自体のマニュアルは、別ファイルを参照してください。ここでは、Version 12 で Molda に追加した、DNA,RNA 構造作成機能、DNA,RNA 塩基置換機能、DNA,RNA 塩基補完機能について記述します。

### 2.13.1 DNA 構造作成

#### 1) Molda のメニュー

Molda のメニューを図 2.122 に示します。DNA,RNA 構造作成機能、DNA,RNA 塩基置換機能、DNA,RNA 補完機能は「Model」メニューに追加されました。

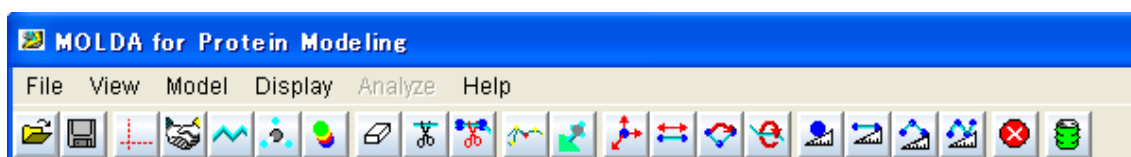


図 2.122 Molda メニュー

#### 2) DNA 構造作成メニュー

DNA 構造作成メニュー 「Model」-「Input」-「DNA」を選択すると、DNA 構造の指定ダイアログが表示されます。DNA 構造作成メニューを図 2.123 に、DNA 構造の指定ダイアログを図 2.124 に示します。ダイアログの入力エリアには、DNA 構成要素の文字(A,G,T,C)を、作成する一方の対のシーケンスとして入力します。ここでは「AAGGCCTT」を入力し、「OK」ボタンをクリックします。作成された DNA 構造が 図 2.125 のように Molda の Viewer に表示されます。対応する塩基は自動で作成されます。

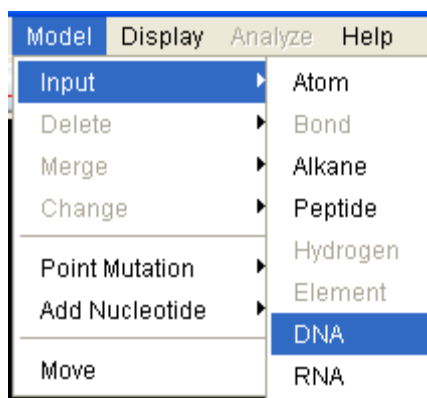


図 2.123 Model Input DNA メニュー



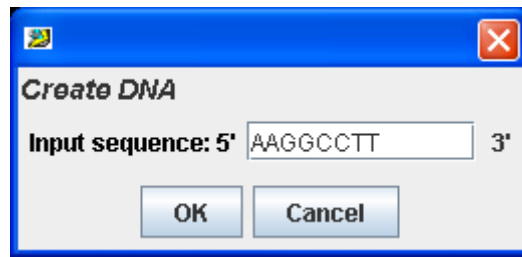


図 2.124 DNA 構造の指定

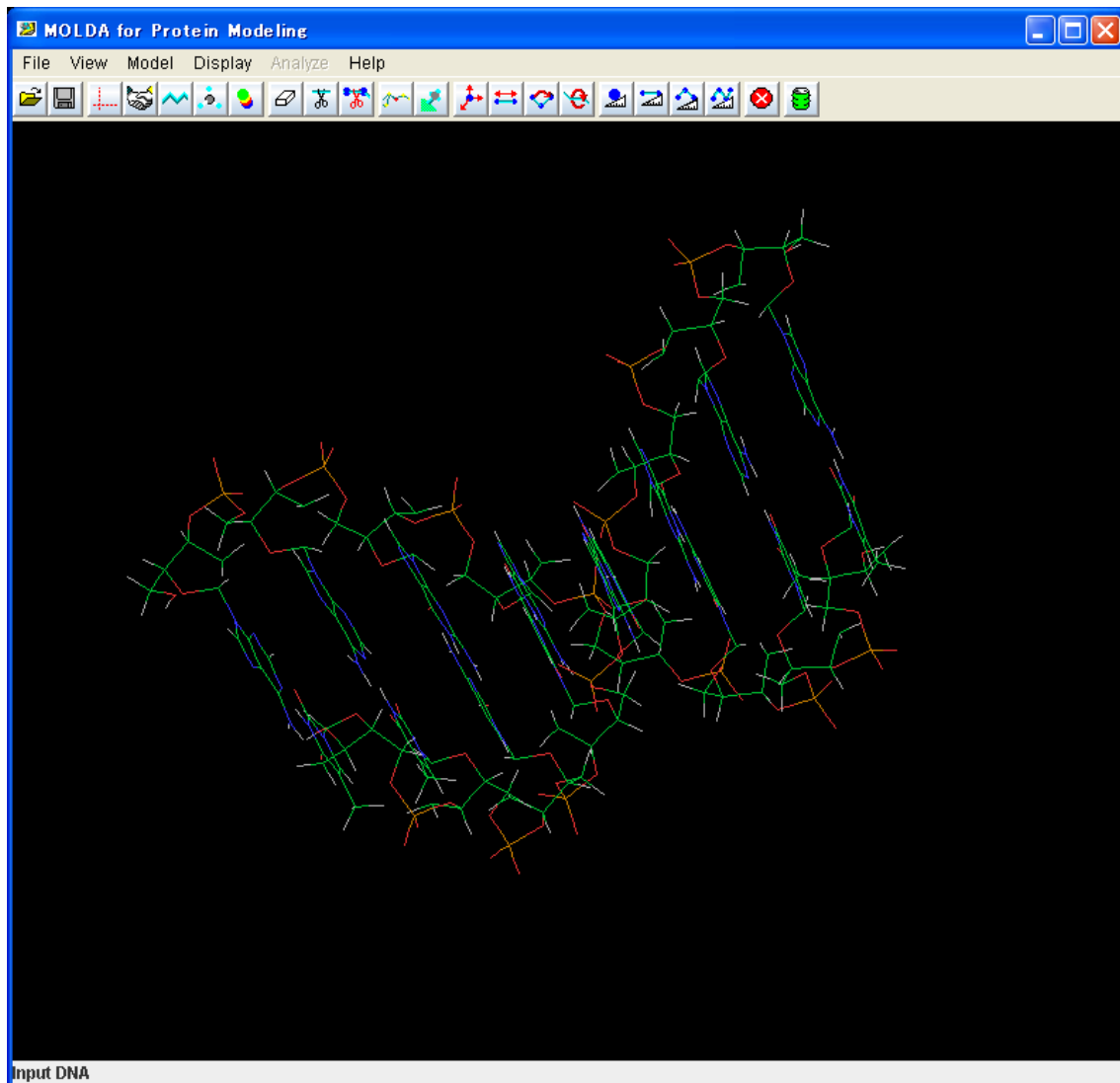


図 2.125 DNA 構造作成結果

### 3) To Viewer

「Display」－「To Viewer」を行うことで、作成した DNA を BioStation Viewer へ 図 2.126 のように反映できます。

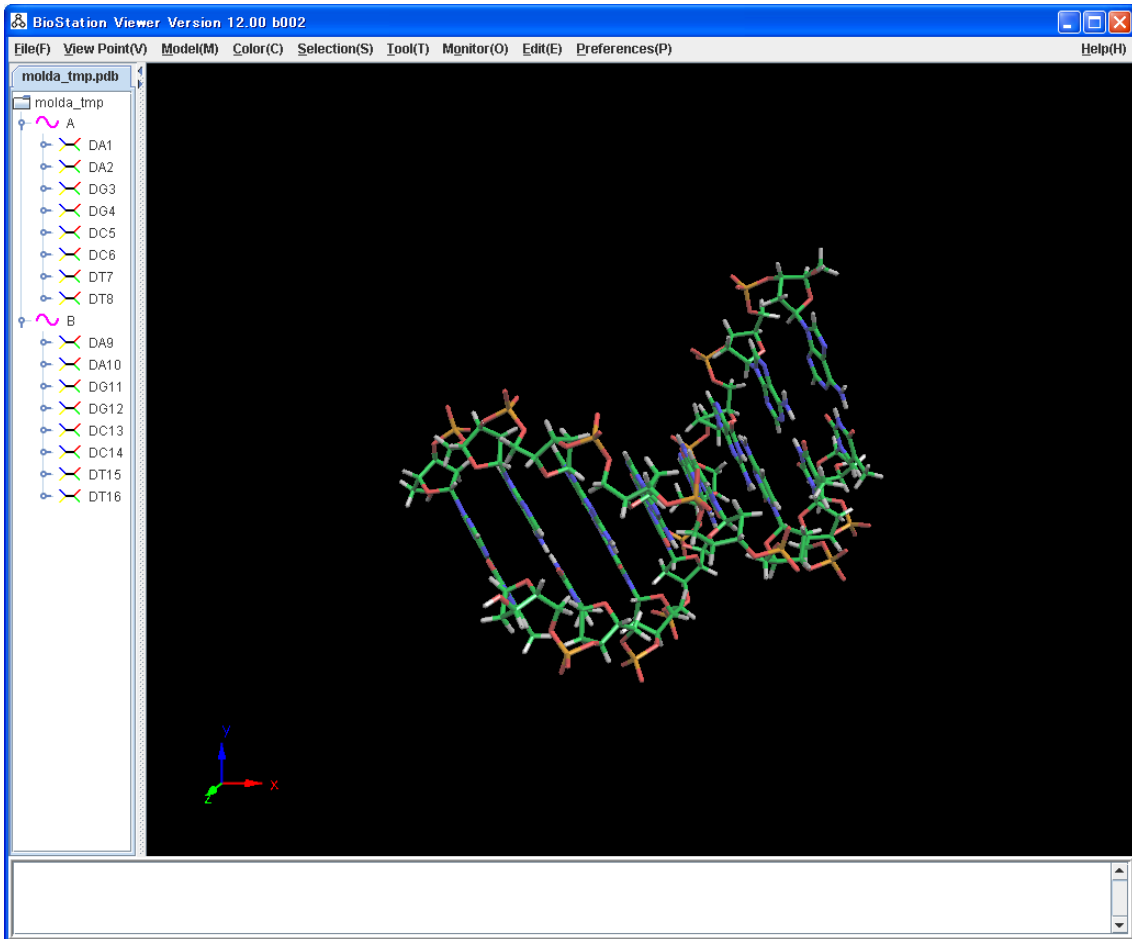


図 2.126 作成した DNA 構造を BioStationViewer へ反映

## 2.13.2 RNA 構造作成

### 1) RNA 構造作成メニュー

RNA 構造作成メニュー 「Model」-「Input」-「RNA」を選択すると、RNA 構造の指定ダイアログが表示されます。DNA 構造作成メニューを図 2.127 に、DNA 構造の指定ダイアログを図 2.128 に示します。ダイアログの入力エリアには、RNA 構成要素の文字 (A,G,C,U) のシーケンスを指定します。ここでは「AAGGCCUU」を入力し、「OK」ボタンをクリックします。作成された RNA 構造が 図 2.129 のように Molda の Viewer に表示されます。

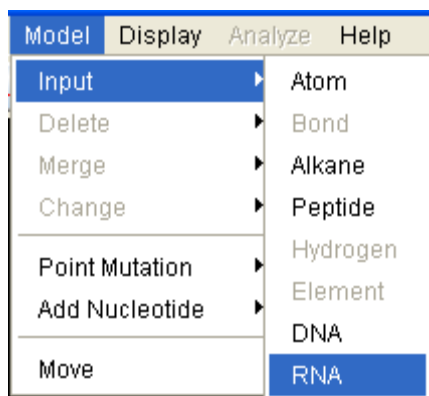


図 2.127 RNA 構造作成メニュー

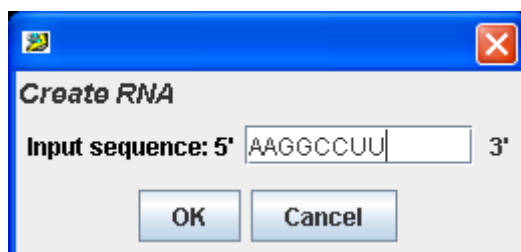


図 2.128 RNA 構造の指定

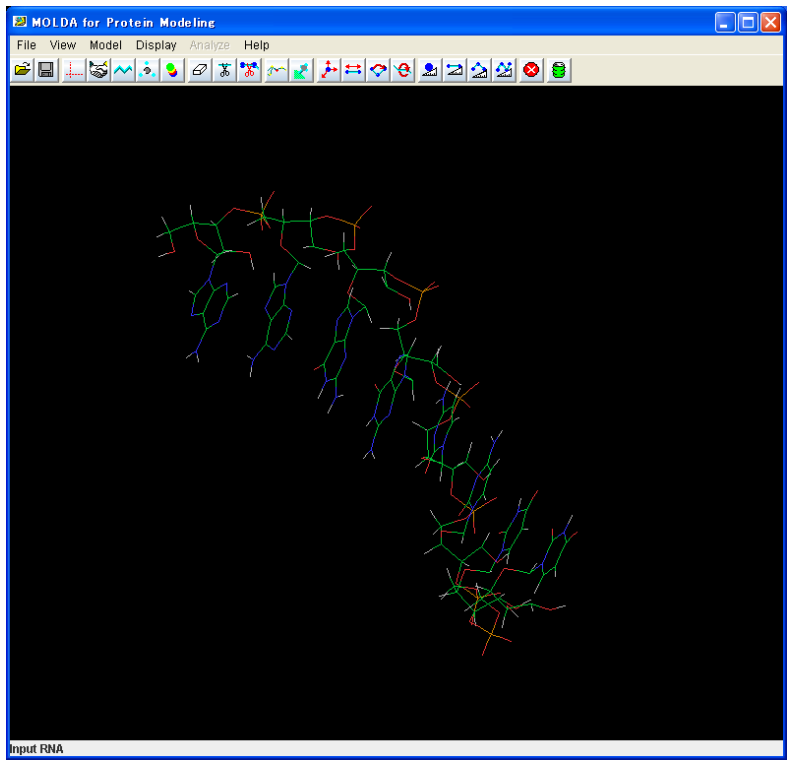


図 2.129 RNA 構造作成結果

2) To Viewer

「Display」-「To Viewer」を行うことで、作成した DNA を BioStation Viewer へ 図 2.130 のように反映できます。

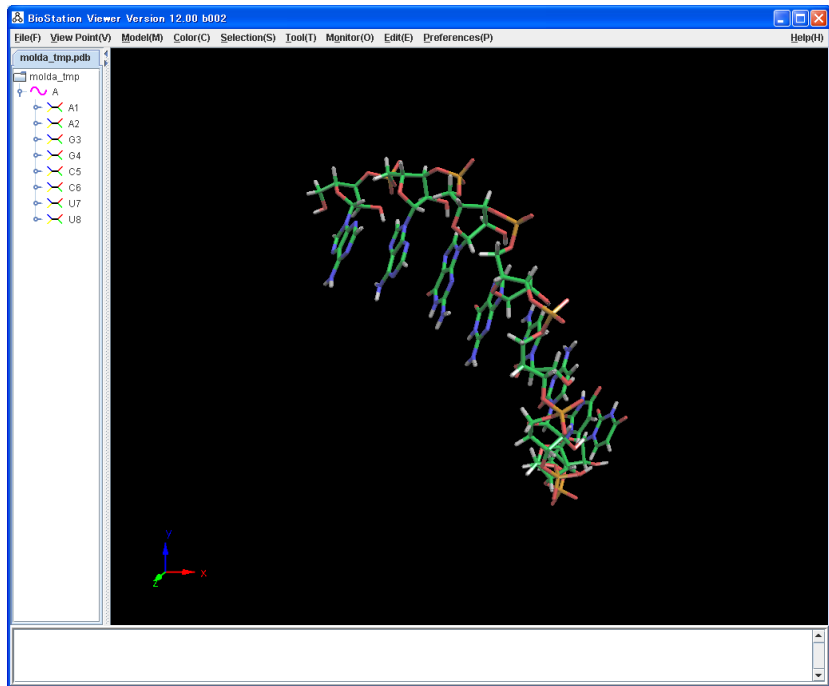


図 2.130 作成した RNA 構造を BioStationViewer へ反映

### 2.13.3 DNA 塩基置換

#### 1) DNA 構造ファイル表示

BioStation Viewer で DNA 構造ファイル(pdb ファイル等)を開きます。

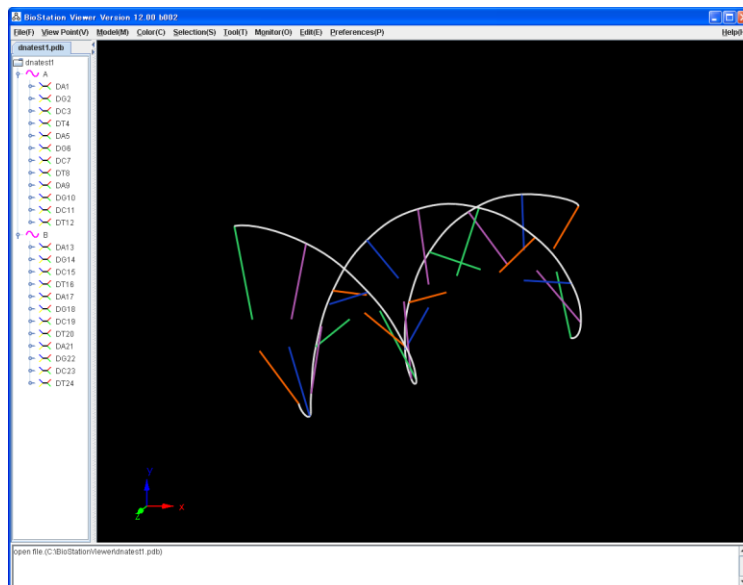


図 2.131 BioStation Viewer で開いた pdb ファイル

#### 2) Molda で表示

BioStationViewer で表示した DNA 構造を「File」-「Molda[with file]」メニューにより Molda を起動し、表示します。

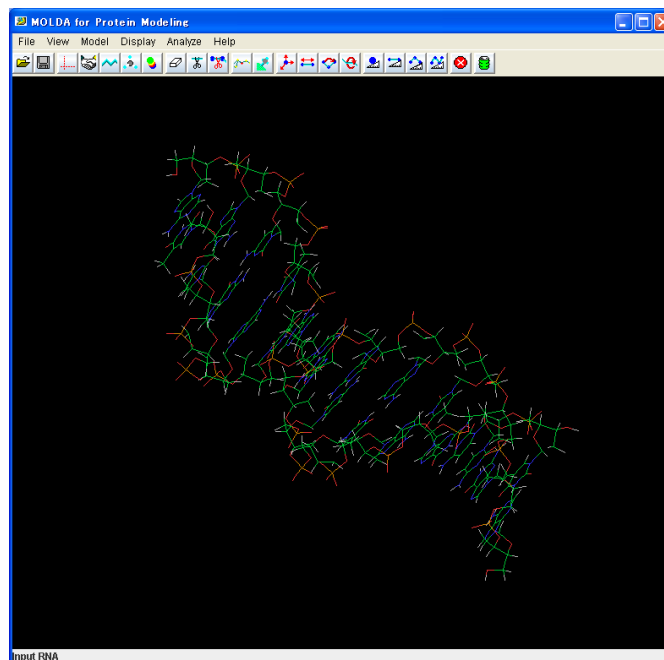


図 2.132 BioStationViewer に表示中の構造を Molda で表示した結果

### 3) DNA 塩基置換準備

DNA の塩基置換を行います。「View」-「Sequence Viewer」を表示し、置換を行う塩基を選択し「OK」をクリックします。Molda に表示されている構造上に選択された塩基が水色の状態となります。ここでは DC3 を選択した例を図 2.133 に示します。Molda に表示されている DNA の構造の DC3 塩基部分が選択された状態を図 2.134 に示します。

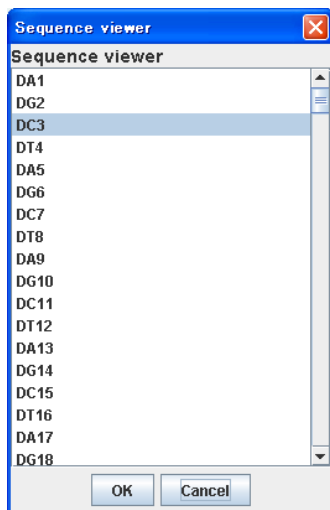


図 2.133 Sequence viewer で DC3 塩基を選択

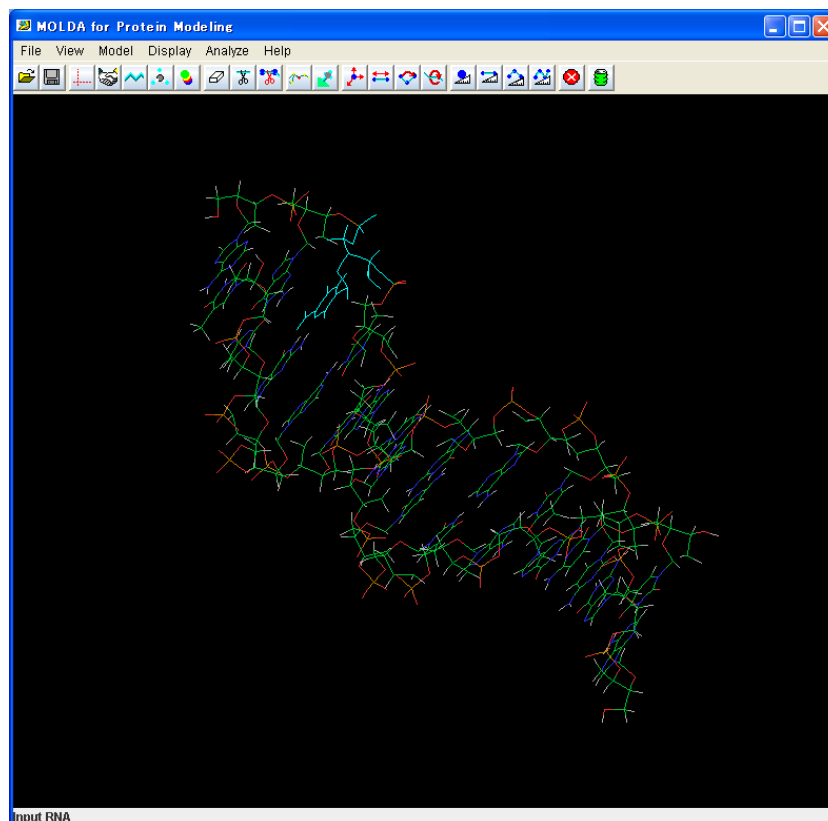


図 2.134 DC3 塩基を選択された状態の Molda Viewer

#### 4) DNA 塩基置換

DNA 塩基置換メニュー 「Model」-「Point Mutation」-「DNA」メニューを選択すると、DNA 塩基置換のダイアログが表示されます。DNA 構造作成メニューを図 2.135 に、DNA 塩基置換のダイアログを図 2.136 に示します。置換する塩基タイプ(DA,DG,DC,DT) から選択し、「OK」をクリックします。DC3を「DT」へ置換するため、「DT」を選択します。塩基置換結果は 図 2.137 のように表示されます。

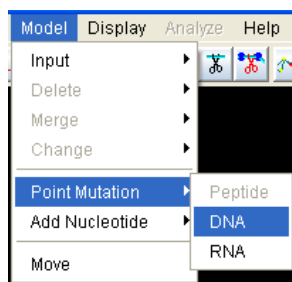


図 2.135 DNA 塩基置換のメニュー

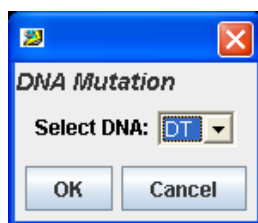


図 2.136 DNA 塩基置換ダイアログ

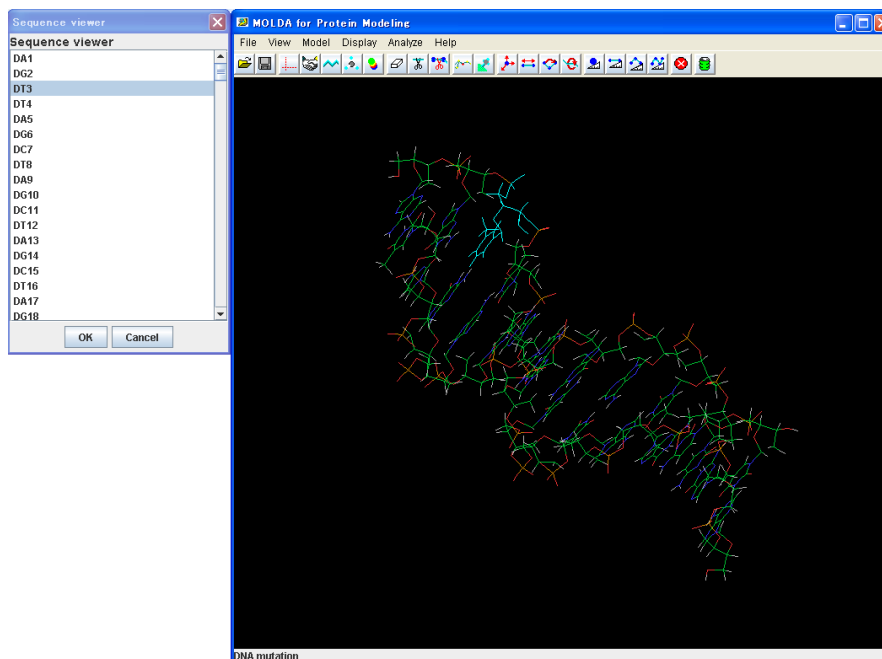


図 2.137 DNA 塩基置換結果表示

5) To Viewer

「Display」-「To Viewer」を行うことで、作成した DNA を BioStation Viewer へ 図 2.138 のように反映できます。

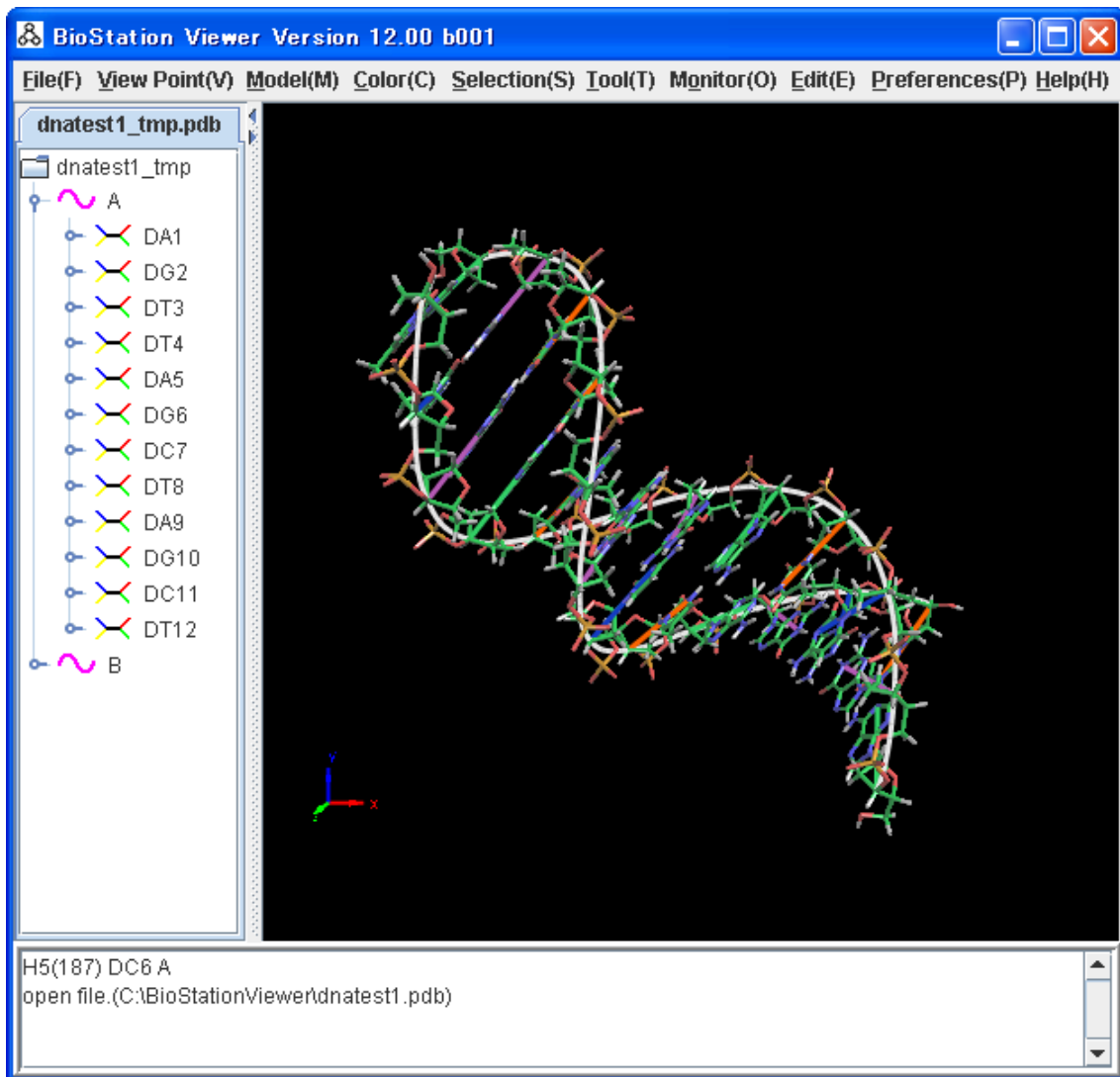


図 2.138 塩基置換した DNA 構造を BioStationViewer へ反映



## 2.13.4 RNA 塩基置換

### 1) BioStationViewer の起動

BioStation Viewer で RNA 構造ファイル(pdb など)を開きます。

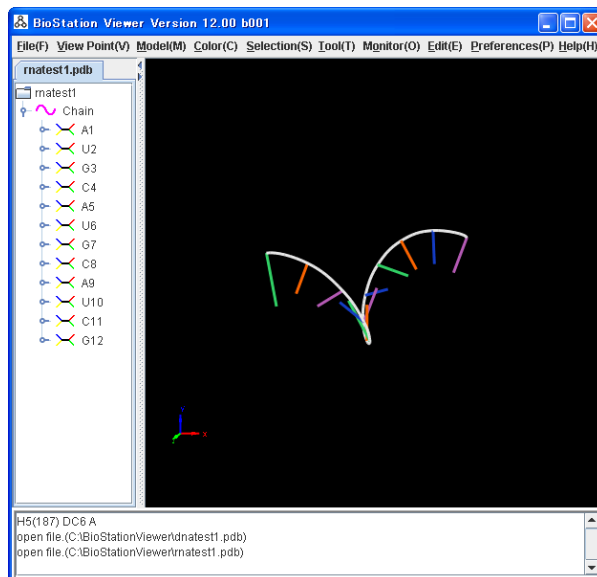


図 2.139 BioStation Viewer で開いた pdb ファイル

### 2) Molda で表示

BioStationViewer で表示した RNA 構造を「File」-「Molda[with file]」メニューにより Molda で表示します。

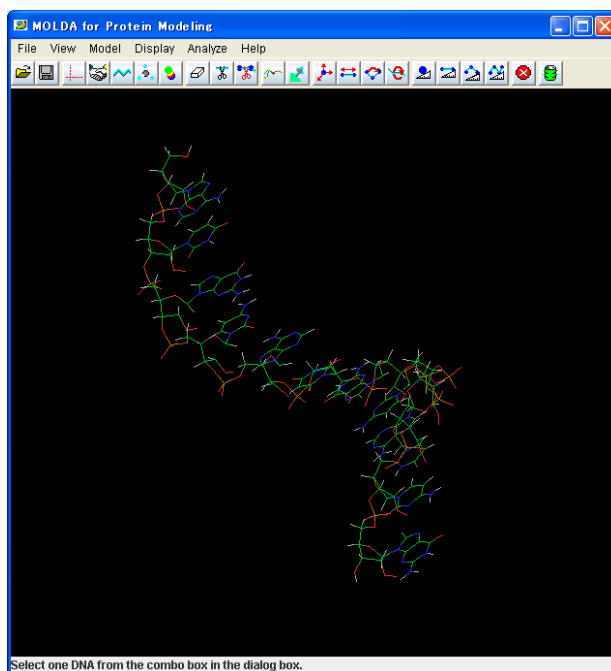


図 2.140 BioStationViewer に表示中の構造を Molda で表示した結果

### 3) RNA 塩基置換準備

RNA の塩基置換を行います。「View」-「Sequence Viewer」を表示し、置換を行う塩基を選択し「OK」をクリックします。Molda に表示されている構造上に選択された塩基が水色の状態となります。ここでは U2 を選択した例を図 2.141 に示します。Molda に表示されている RNA の構造の U2 塩基部分が選択された状態を図 2.142 に示します。

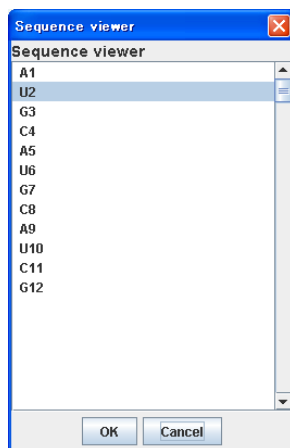


図 2.141 Sequence viewer で U2 塩基を選択

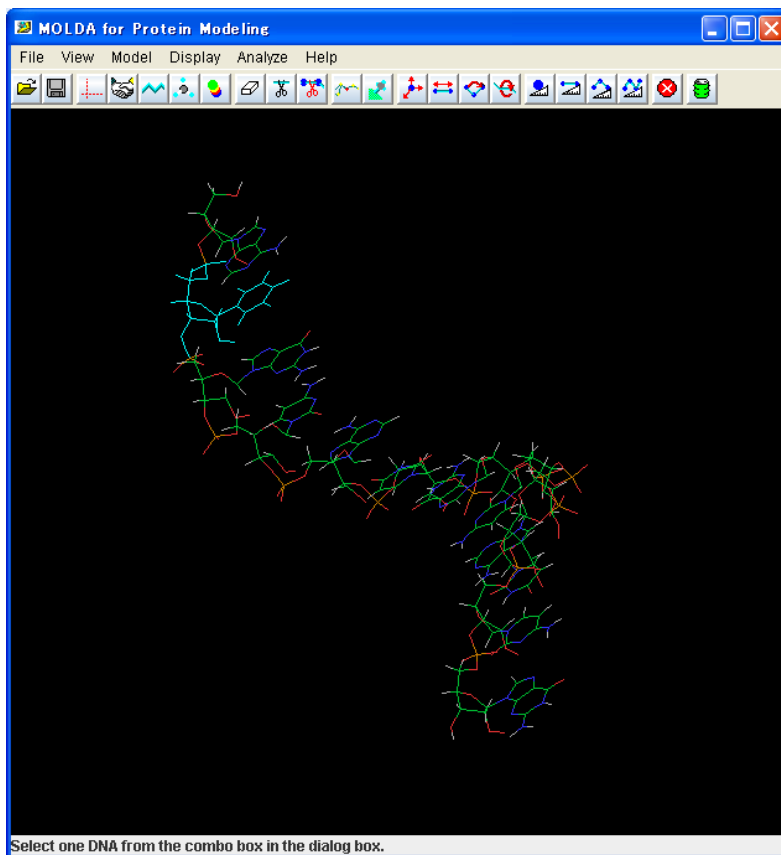


図 2.142 U2 塩基を選択された状態の Molda Viewer

#### 4) RNA 塩基置換

RNA 塩基置換メニュー「Model」-「Point Mutation」-「RNA」メニュー選択すると、RNA 塩基置換のダイアログが表示されます。RNA 塩基置換メニューを図 2.143 に、RNA 塩基置換のダイアログを図 2.144 に示します。置換する塩基タイプ(A,G,C,U)から選択し、「OK」をクリックします。ここではU2をAに置換します。このため、「A」を選択します。置換結果が図 2.145 のように表示されます。

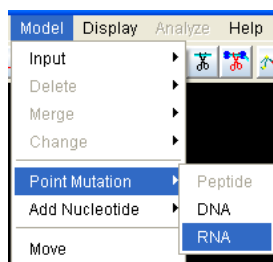


図 2.143 RNA 塩基置換のメニュー

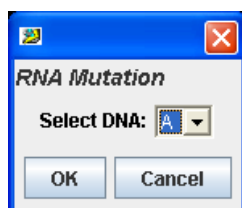


図 2.144 RNA 塩基置換ダイアログ

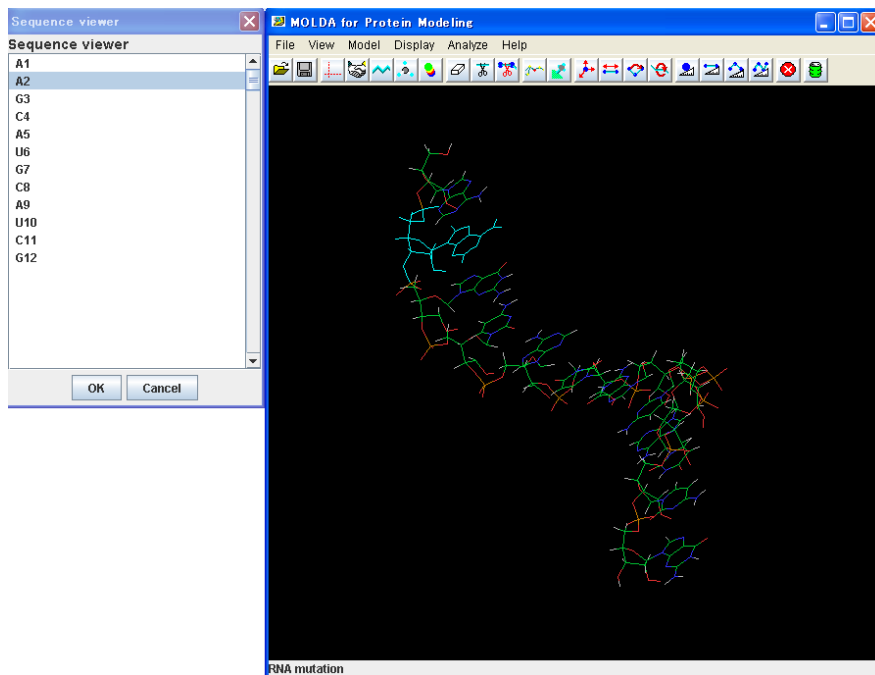


図 2.145 RNA 塩基置換結果表示

5) To Viewer

「Display」-「To Viewer」を行うことで、作成した RNA を BioStation Viewer へ 図 2.146 のように反映できます。

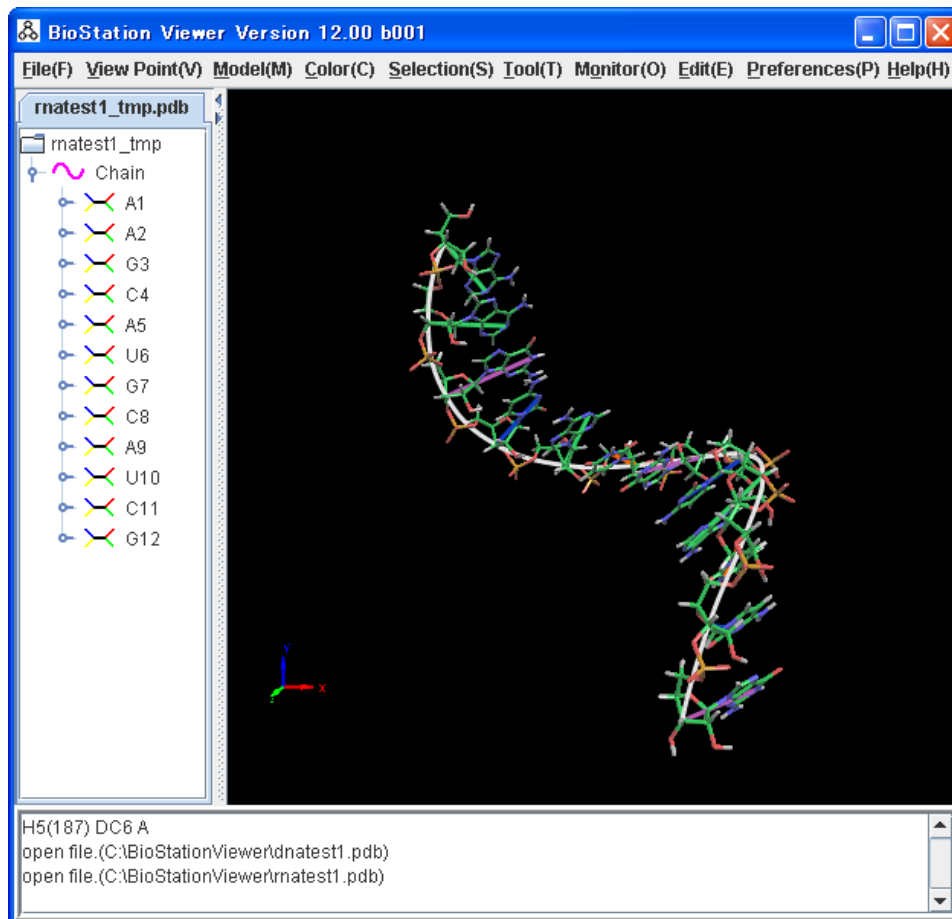


図 2.146 塩基置換した RNA 構造を BioStationViewer へ反映

### 2.13.5 DNA 塩基補完

塩基補完には Position に 5'Terminal、3'Terminal、Middle のいずれかを指定し、補完するシーケンスを指定します。5'Terminal は、5'端へ塩基を補完します。3'Terminal は、3'端へ塩基を補完します。Middle は、末端以外のところへ塩基を追加します。

DNA 塩基補完では 3 パターンの Position の操作方法を示します。

#### 2.13.5.1 Position: 5'Terminal

5'Terminal 方向に塩基を補完します。

##### 1) BioStationViewer の起動

BioStation Viewer で DNA 構造ファイル(pdb など)を開きます。ここでは見やすいように Atom 表示を Off、Structurs C $\alpha$  [line]表示とし、「Tool」-「Label」の「Residue Label」を On にします。以下の DNA 構造は B 鎖 DC9 に対応する A 鎖の塩基が欠落しています。これを補完します。

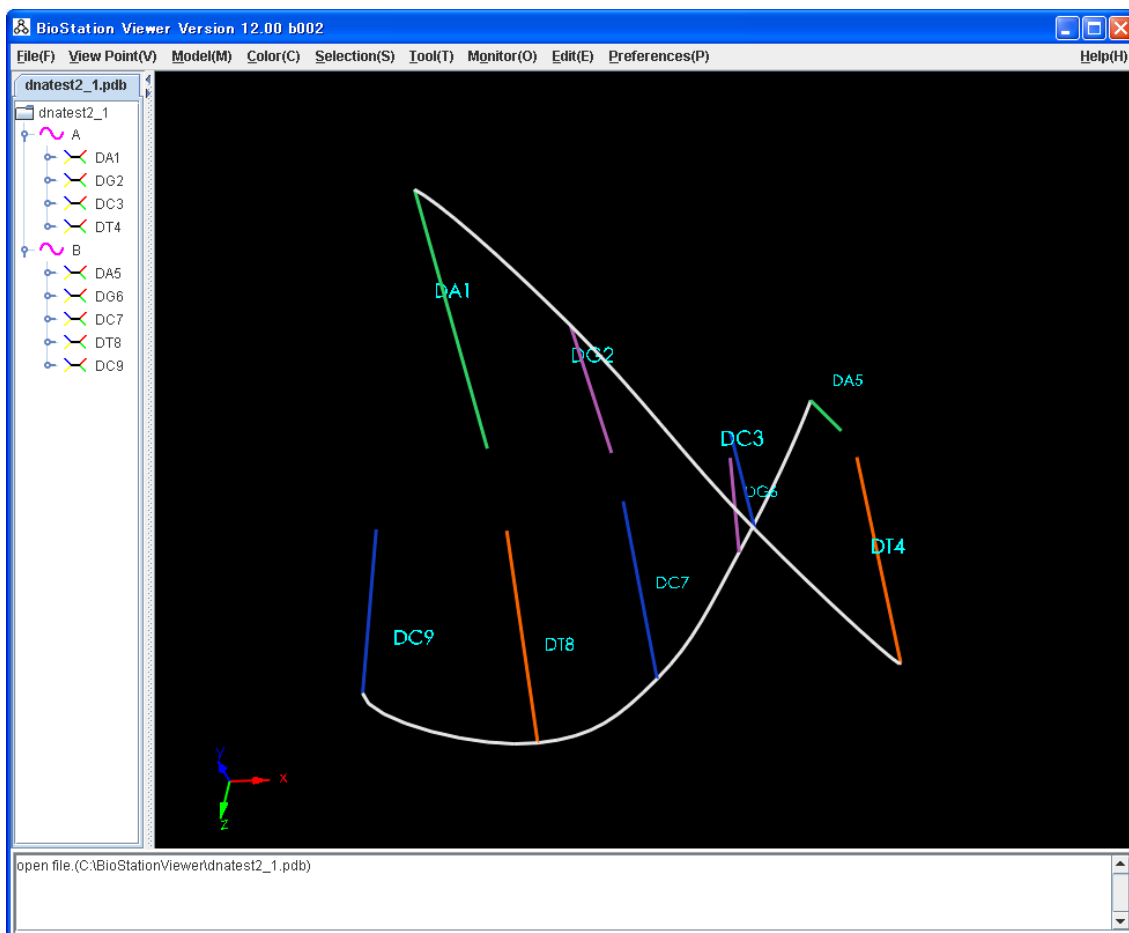


図 2.147 BioStation Viewer で開いた pdb ファイル

## 2) Molda の起動

BioStationViewer で表示した DNA 構造を「File」-「Molda[with file]」メニューにより Molda で表示します。

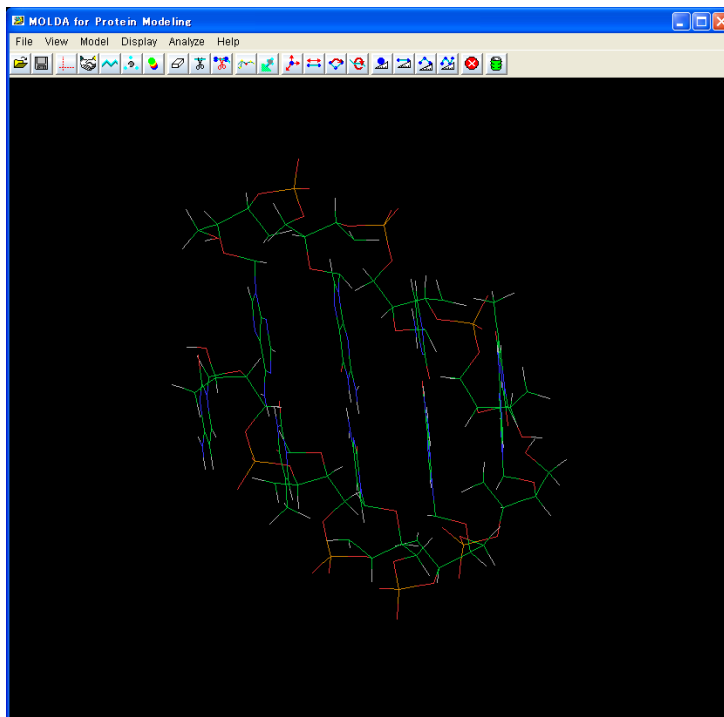


図 2.148 BioStationViewer に表示中の構造を Molda で表示した結果

## 3) DNA 塩基補完準備

DNA の塩基補完を行います。「View」-「Sequence Viewer」を表示し、補完を行う基点となる塩基を選択し「OK」をクリックします。ここでは DA1 を選択し、図 2.149 に示します。Molda に表示されている構造上に選択された塩基が水色に選択された状態となります。Molda に表示されている DA1 が選択された状態を 図 2.150 に示します。

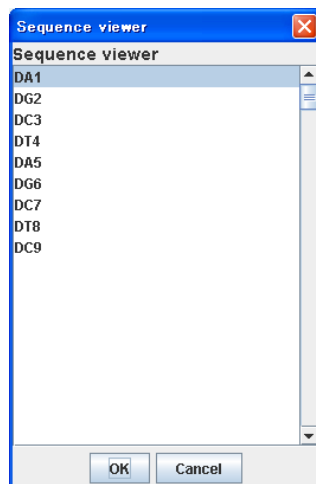


図 2.149 Sequence viewer で DA1 塩基を選択

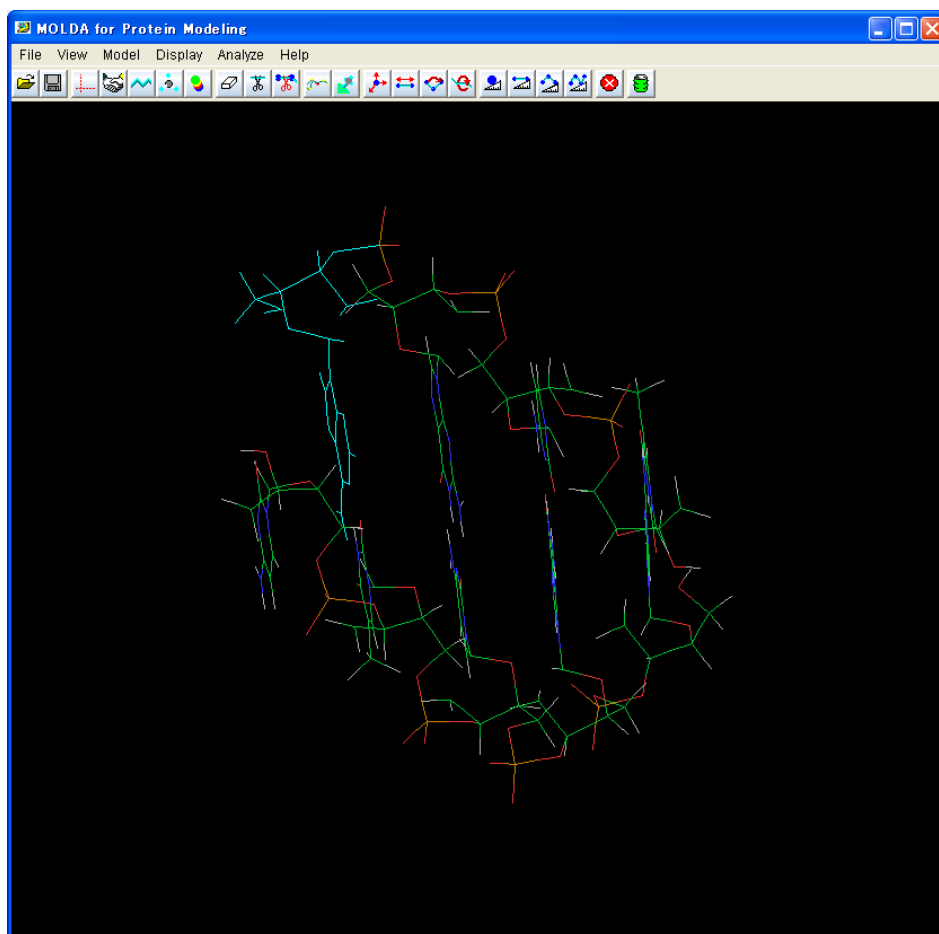


図 2.150 DA1 塩基を選択された状態の Molda Viewer

#### 4) DNA 塩基補完

DNA 塩基補完メニュー「Model」-「Add Nucleotide」-「DNA」メニューを選択すると、DNA 塩基補完のダイアログが表示されます。DNA 塩基補完メニューを図 2.151 に、DNA 塩基補完のダイアログを図 2.152 に示します。補完する方向を Position で、5'Terminal、3'Terminal、Middle から選択します。ここでは 5'Terminal を選択します。ダイアログの入力エリアには、選択した塩基に対し、Position 指定した方向に補完する塩基を DNA 構成要素の文字(A,G,T,C)を使用して、シーケンスとして入力します。ここでは「G」を入力し、「OK」ボタンをクリックします。塩基の補完結果は図 2.153 のようになります。

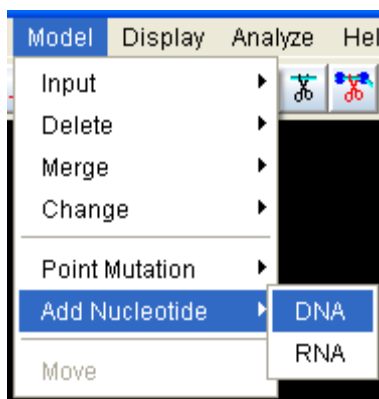


図 2.151 DNA 塩基補完のメニュー

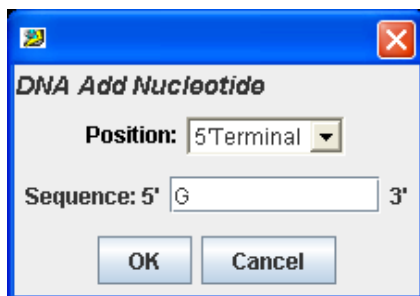


図 2.152 DNA 塩基補完ダイアログ



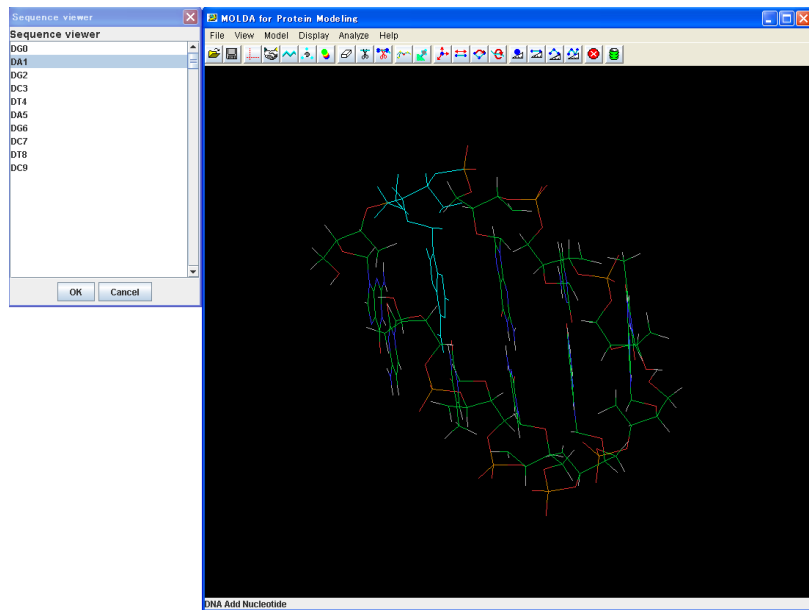


図 2.153 DNA 塩基補完結果表示

**注意**

- ※ 補完する対象の鎖に 2 つ以上の塩基がない場合、補完処理は実施できません。
- ※ Position に 5'Terminal を指定する場合、選択した基点となる塩基がその鎖の始端でなければなりません。

5) To Viewer

「Display」－「To Viewer」を行うことで、補完した DNA を BioStation Viewer へ 図 2.154 のように反映できます。

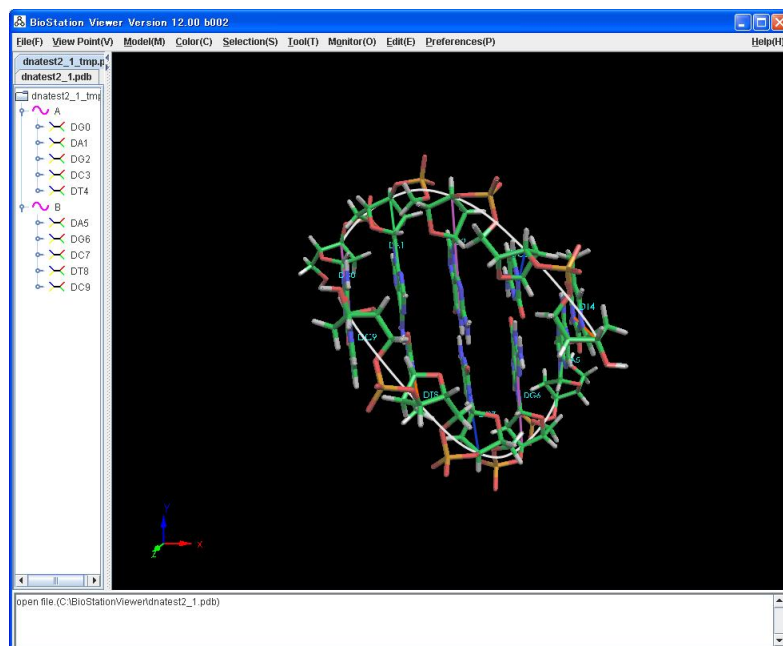


図 2.154 塩基補完した DNA 構造を BioStationViewer へ反映

### 2.13.5.2 Position: Middle

Middle 方向に塩基を補充します。

#### 1) BioStation Viewer の起動

BioStation Viewer で DNA 構造ファイル(pdb など)を開きます。ここでは見やすいように Atom 表示を Off、Structurs C  $\alpha$  [line]表示とし、「Tool」-「Label」の「Residue Label」を On にします。以下の DNA 構造は A 鎖 DG2、DG3 に対応する B 鎖の塩基が欠落しています。これを補充します。

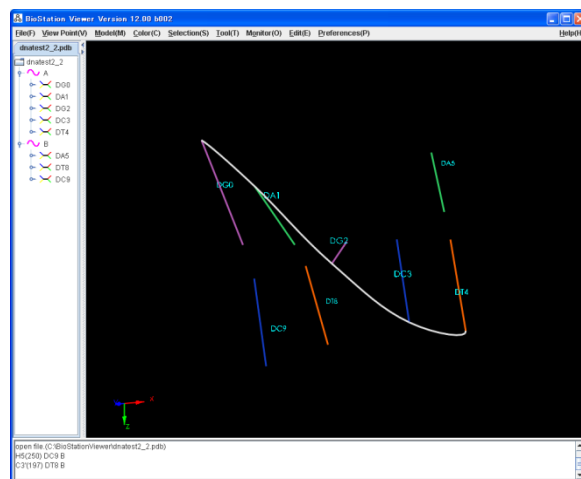


図 2.155 BioStation Viewer で開いた pdb ファイル

#### 2) Molda の起動

BioStationViewer で表示した DNA 構造を「File」-「Molda[with file]」メニューにより Molda で表示します。

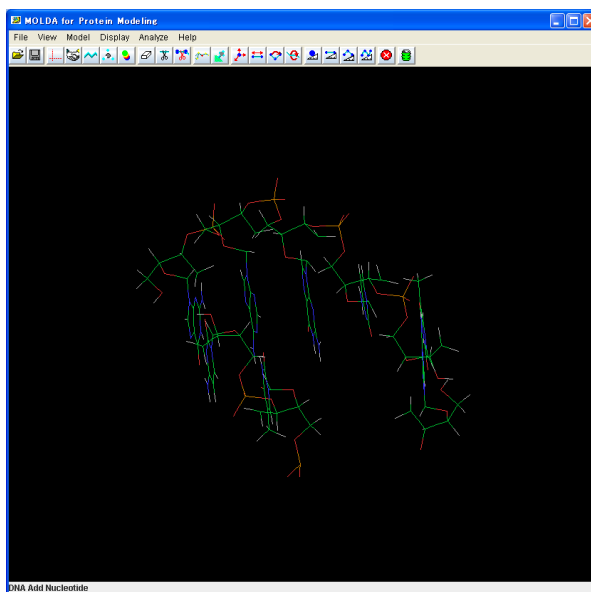


図 2.156 BioStationViewer に表示中の構造を Molda で表示した結果

### 3) DNA 塩基補完準備

DNA の塩基補完を行います。「View」-「Sequence Viewer」を表示し、補完を行う基点となる塩基を選択し「OK」をクリックします。ここでは、DA5を選択し、図 2.157 に示します。Molda に表示されている構造上に選択された塩基が水色に選択された状態となります。Molda に表示されている DA5 が選択された状態を 図 2.158 に示します。

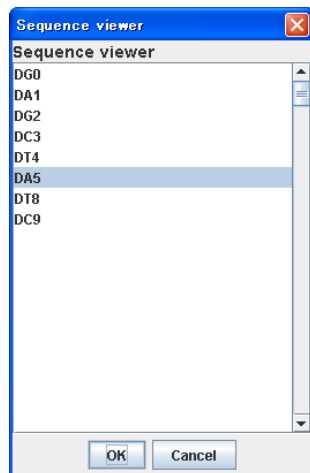


図 2.157 Sequence viewer で DA5 塩基を選択

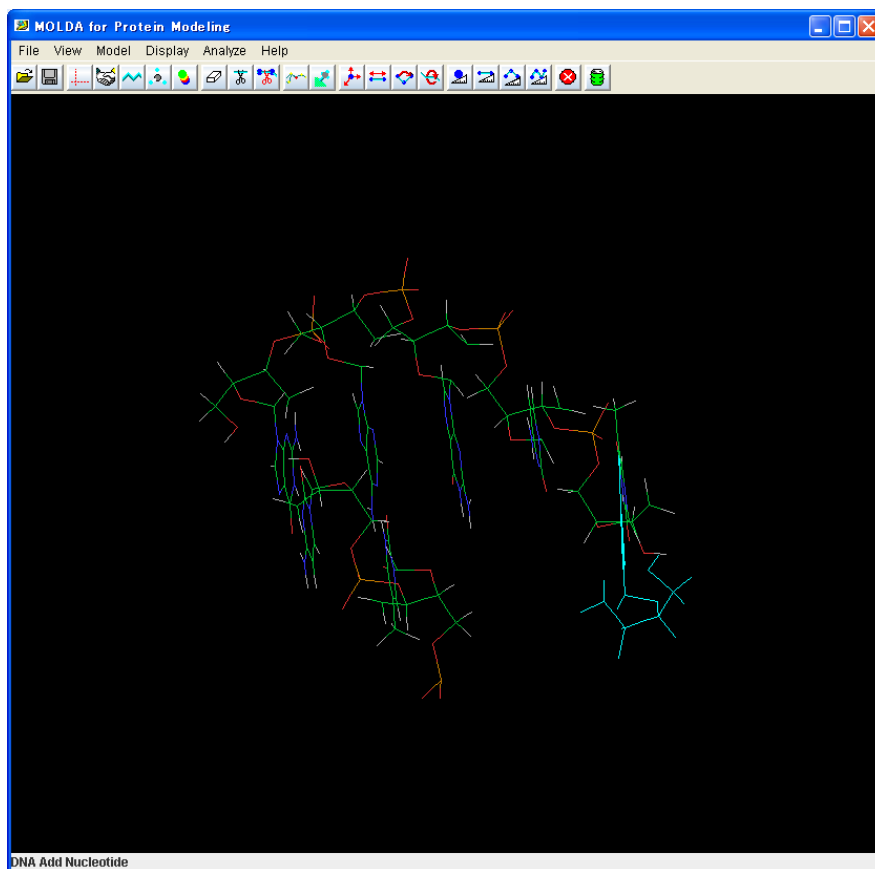


図 2.158 DA5 塩基を選択された状態の Molda Viewer

#### 4) DNA 塩基補完

「Model」-「Add Nucleotide」-「DNA」メニューを選択すると、DNA 塩基補完のダイアログが表示されます。補完する方向を Position で、5'Terminal、3'Terminal、Middle から選択します。ここでは Middle を選択します。ダイアログの入力エリアには、選択した塩基に対し、Position 指定した方向に補完する塩基を DNA 構成要素の文字(A,G,T,C)を使用して、シーケンスとして入力します。ここでは「GC」を入力し、「OK」ボタンをクリックします。DNA 塩基補完ダイアログを 図 2.159 に示します。補完結果が 図 2.160 のように表示されます。

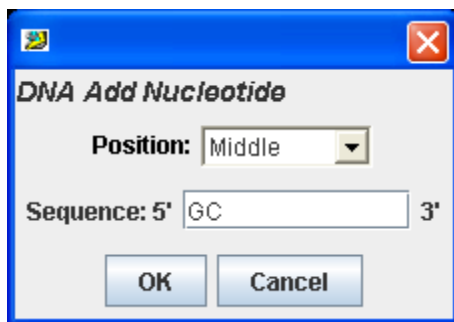


図 2.159 DNA 塩基補完ダイアログ

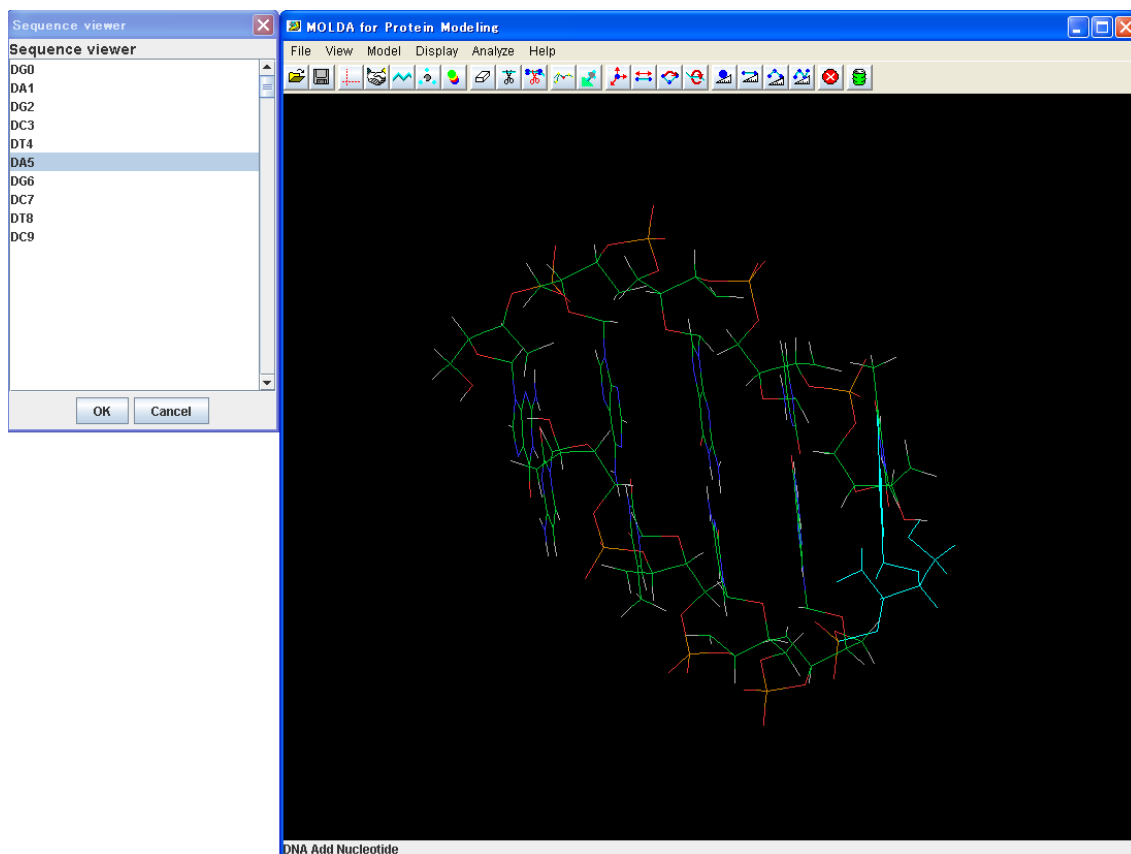


図 2.160 DNA 塩基補完結果表示

## 注意

- ※ 補完する対象の鎖に 2 つ以上の塩基がない場合、補完処理は実施できません。
- ※ Position に Middle を指定する場合、選択した基点となる塩基がその鎖の始端か中間でなければなりません。
- ※ Position に Middle を指定する場合、欠落している塩基の数以上の塩基を指定することはできません。

## 5) To Viewer

「Display」-「To Viewer」を行うことで、補完した DNA を BioStation Viewer へ 図 2.161 のように反映できます。

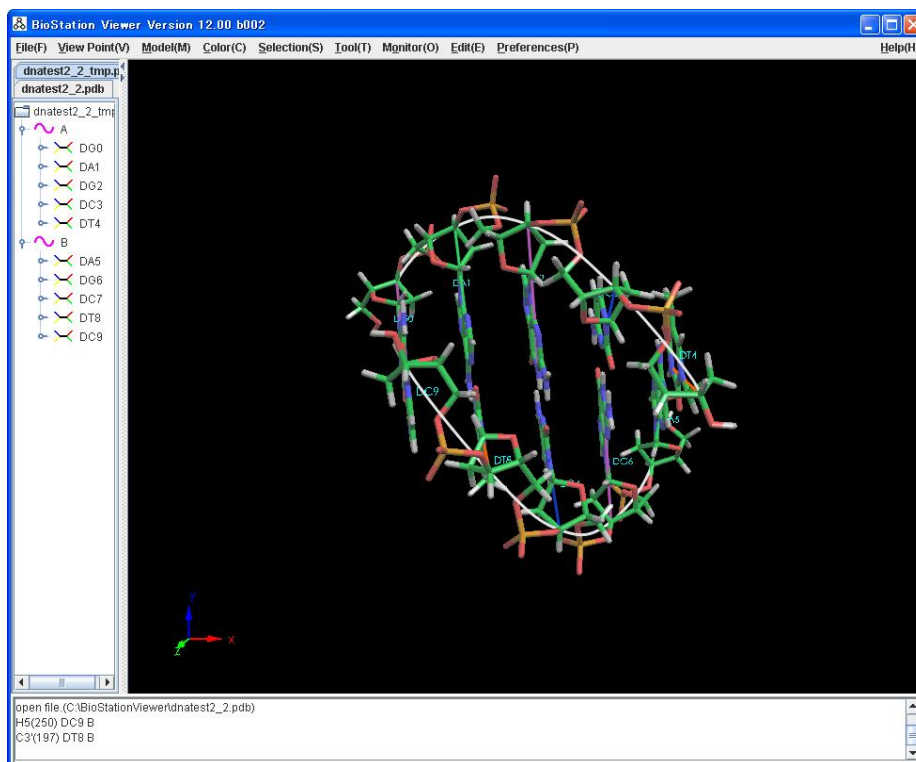


図 2.161 BioStationViewer に表示中の構造を Molda で表示した結果

### 2.13.5.3 Position: 3' Terminal

#### 1) BioStation Viewer の起動

BioStation Viewer で DNA 構造ファイル(pdb など)を開きます。ここでは見やすいように Atom 表示を Off、Structurs C $\alpha$  [line]表示とし、「Tool」-「Label」の「Residue Label」を On にします。以下の DNA 構造は B 鎖 DA4 に対応する A 鎖の塩基が欠落しています。これを補完します。

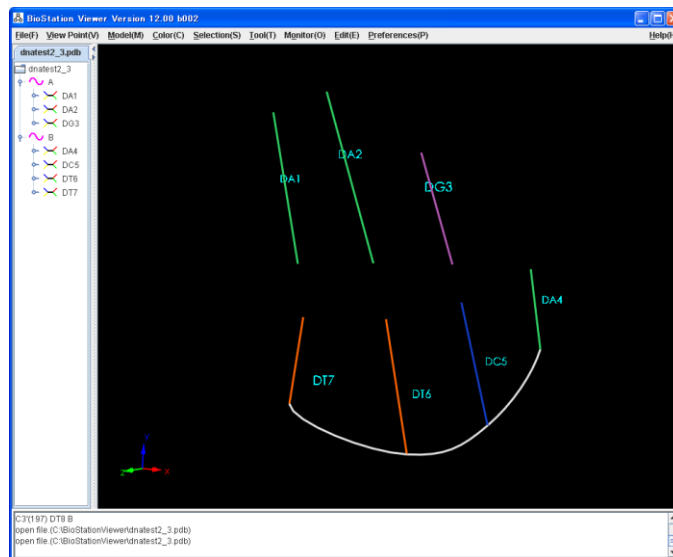


図 2.162 BioStation Viewer で開いた pdb ファイル

#### 2) Molda の起動

BioStationViewer で表示した DNA 構造を「File」-「Molda[with file]」メニューにより Molda で表示します。

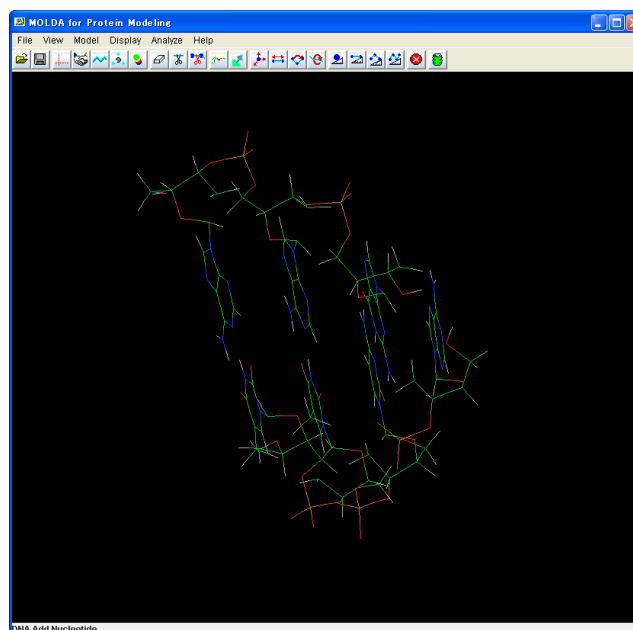


図 2.163 BioStationViewer に表示中の構造を Molda で表示した結果

### 3) DNA 塩基補完準備

DNA の塩基補完を行います。「View」-「Sequence Viewer」を表示し、補完を行う基点となる塩基を選択し「OK」をクリックします。ここでは、DC3を選択し、図 2.164 に示します。Molda に表示されている構造上に選択された塩基が水色に選択された状態となります。Molda に表示されている DG3が選択された状態を 図 2.165 に示します。

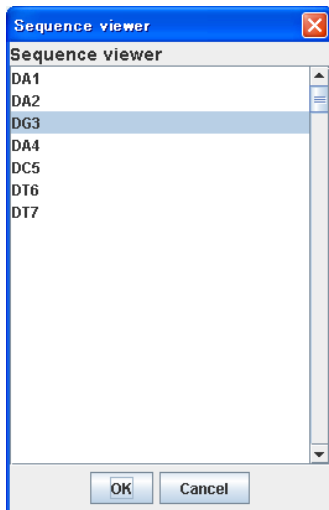


図 2.164 Sequence viewer で DG3 塩基を選択

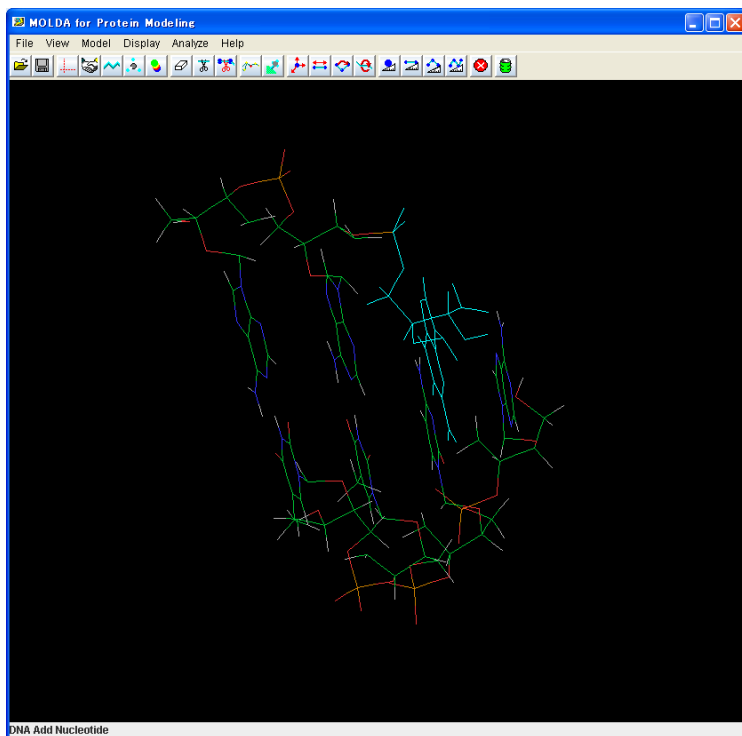


図 2.165 DA4 塩基を選択された状態の Molda Viewer

#### 4) DNA 塩基補完

「Model」-「Add Nucleotide」-「DNA」メニューを選択すると、DNA 塩基補完のダイアログが表示されます。補完する方向を Position で、5' Terminal、3' Terminal、Middle から選択します。ここでは 3' Terminal を選択します。ダイアログの入力エリアには、選択した塩基に対し、Position 指定した方向に補完する塩基を DNA 構成要素の文字(A,G,T,C)を使用して、シーケンスとして入力します。ここでは「C」を入力し、「OK」ボタンをクリックします。DNA 塩基補完ダイアログを 図 2.166 に示します。補完結果が 図 2.167 のように表示されます。

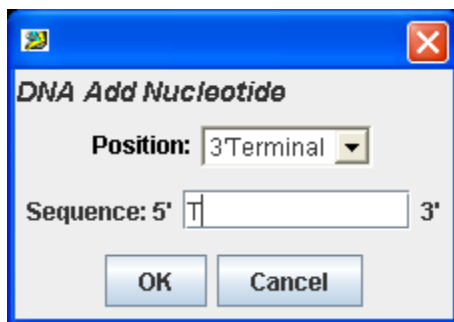


図 2.166 DNA 塩基補完ダイアログ

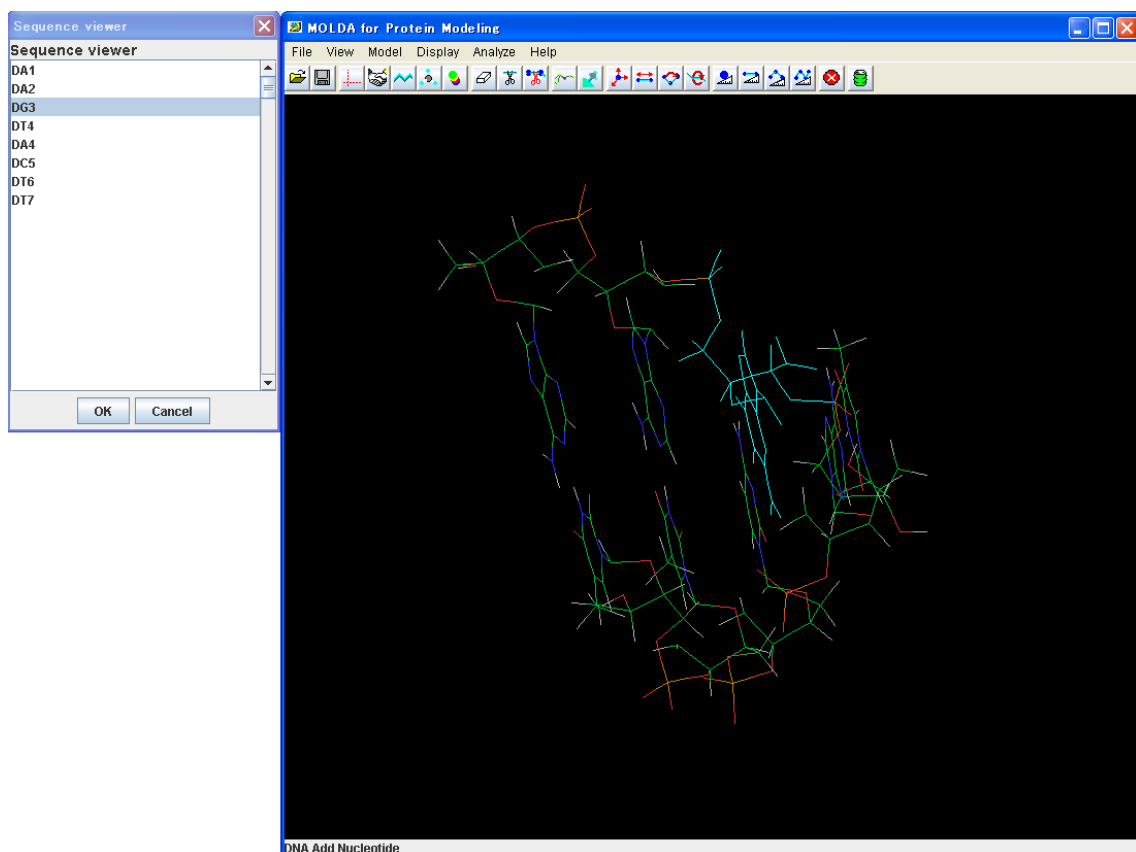


図 2.167 DNA 塩基補完結果表示



## 注意

- ※ 補完する対象の鎖に 2 つ以上の塩基がない場合、補完処理は実施できません。
- ※ Position: 3'Terminal を指定する場合、選択した基点となる塩基がその鎖の終端でなければなりません。
- ※ Position に 3'Terminal を指定する場合、基点となる塩基は 5'Terminal 方向に塩基と接続していなければなりません。塩基が欠落して接続がない場合には、Position: Middle を指定するなどして、中間の欠落している塩基を補完した後に、Position: 3'Terminal の補完を行うようにしてください。

## 5) To Viewer

「Display」－「To Viewer」を行うことで、補完した DNA を BioStation Viewer へ 図 2.168 のように反映できます。

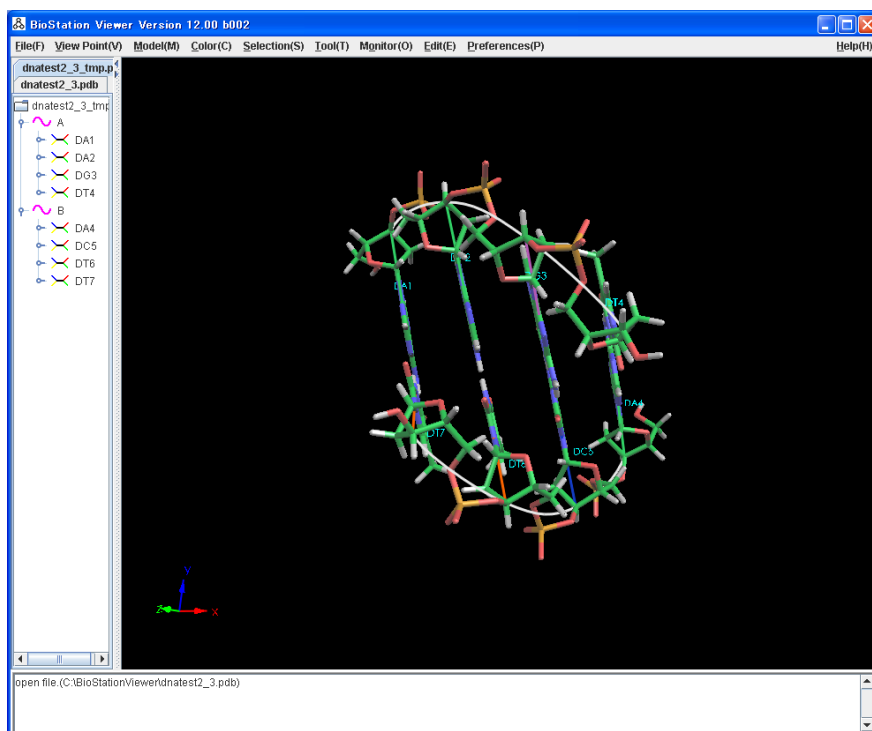


図 2.168 塩基補完した DNA 構造を BioStationViewer へ反映

### 2.13.6 RNA 塩基補完

RNA 塩基補完は DNA 塩基補完と操作と同じです。

Position に Middle を指定した操作手順を例に示します。

#### 1) BioStation Viewer の起動

BioStation Viewer で RNA 構造ファイル(pdb など)を開きます。ここでは見やすいように Atom 表示を Off、Structurs C $\alpha$  [line]表示とし、「Tool」-「Label」の「Residue Label」を On にします。以下の RNA 構造は G3 から C8 間の延期が欠落しています。これを補完します。

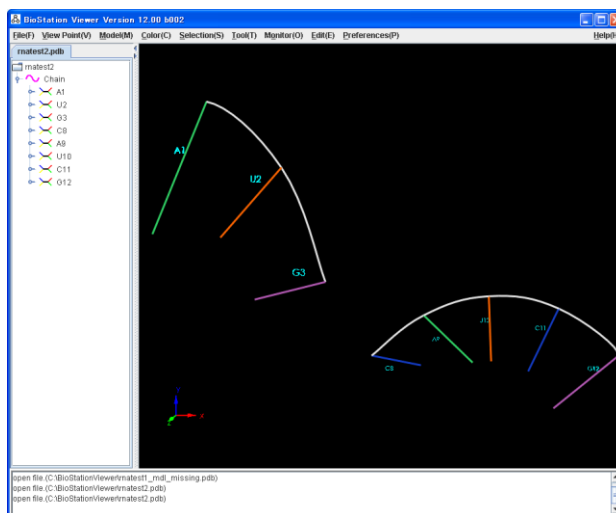


図 2.169 BioStation Viewer で開いた pdb ファイル

#### 2) Molda の起動

BioStationViewer で表示した DNA 構造を「File」-「Molda[with file]」メニューにより Molda で表示します。

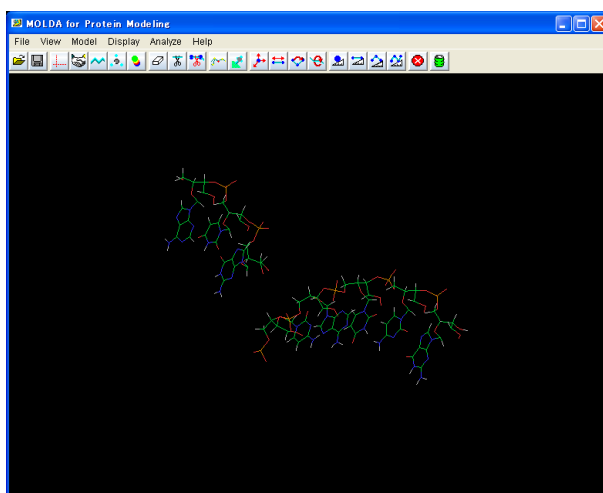


図 2.170 BioStationViewer に表示中の構造を Molda で表示した結果

### 3) RNA 塩基補完準備

RNA の塩基補完を行います。「View」-「Sequence Viewer」を表示し、補完を行う基点となる塩基を選択し「OK」をクリックします。ここでは、G3を選択し、図 2.171 に示します。Moldaに表示されている構造上に選択された塩基が水色に選択された状態となります。Molda に表示されているG3が選択された状態を 図 2.172 に示します。

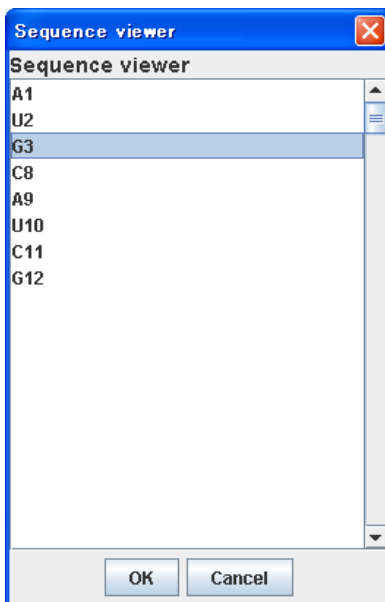


図 2.171 Sequence viewer で G3 塩基を選択

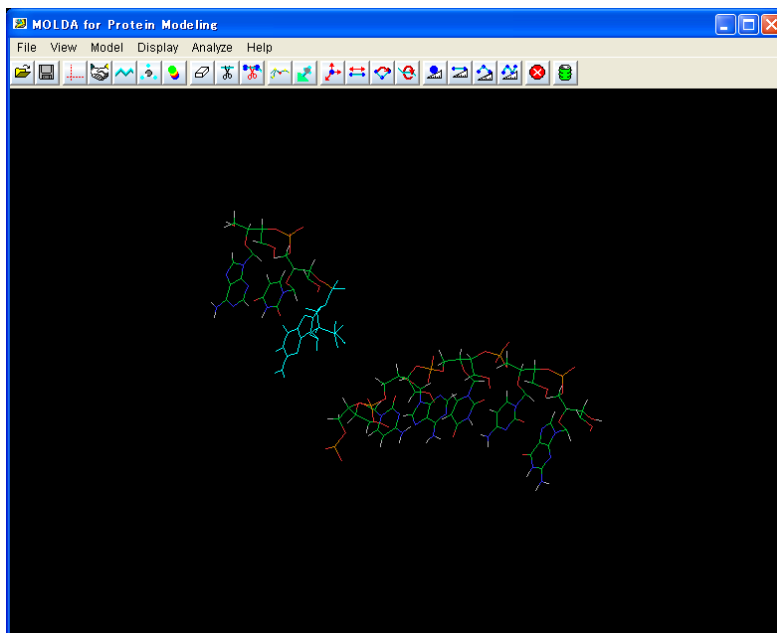


図 2.172 G3 塩基を選択された状態の Molda Viewer

#### 4) RNA 塩基補完

「Model」-「Add Nucleotide」-「RNA」メニューを選択すると、RNA 塩基補完のダイアログが表示されます。RNA 塩基補完メニューを図 2.173 に、RNA 塩基補完のダイアログを図 2.174 に示します。補完する方向を Position で、5'Terminal、3'Terminal、Middle から選択します。ここでは Middle を選択します。ダイアログの入力エリアには、選択した塩基に対し、Position 指定した方向に補完する塩基を RNA 構成要素の文字(A,G,U,C)を使用して、シーケンスとして入力します。ここでは「AGU」を入力し、「OK」ボタンをクリックします。補完結果が 図 2.175 のように表示されます。

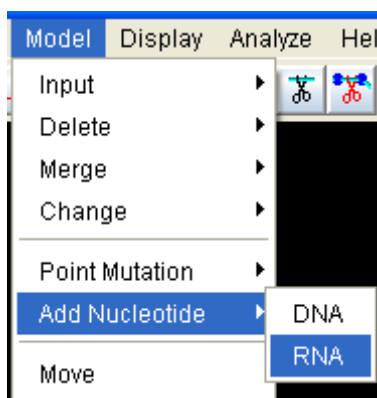


図 2.173 RNA 塩基補完のメニュー

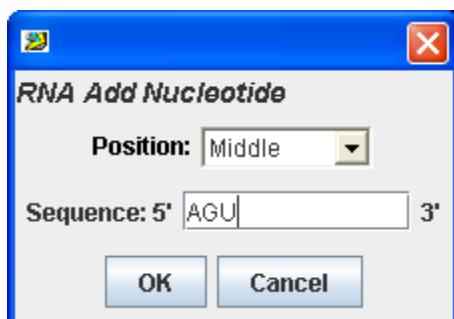


図 2.174 RNA 塩基補完ダイアログ

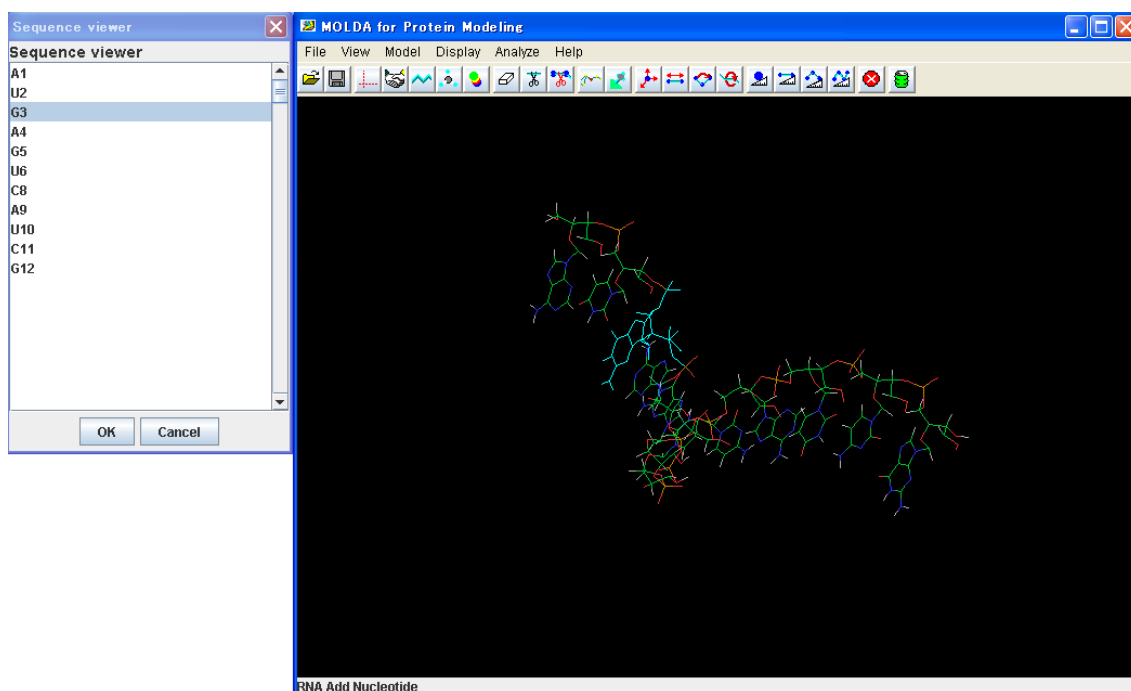


図 2.175 RNA 塩基補完結果表示

### 注意

- ※ 補完する対象の鎖に 2 つ以上の塩基がない場合、補完処理は実施できません。
- ※ Position に 5'Terminal を指定する場合、選択した基点となる塩基がその鎖の始端でなければなりません。
- ※ Position に Middle を指定する場合、選択した基点となる塩基がその鎖の始端か中間でなければなりません。
- ※ Position に Middle を指定する場合、欠落している塩基の数以上の塩基を指定することはできません。
- ※ Position : 3'Terminal を指定する場合、選択した基点となる塩基がその鎖の終端でなければなりません。
- ※ Position に 3'Terminal を指定する場合、基点となる塩基は 5'Terminal 方向に塩基と接続していなければなりません。塩基が欠落して接続がない場合には、中間の欠落している塩基を補完した後に 3'Terminal の補完を行うようにしてください。

## 5) To Viewer

「Display」－「To Viewer」を行うことで、補完した DNA を BioStation Viewer へ 図 2.176 のように反映できます。

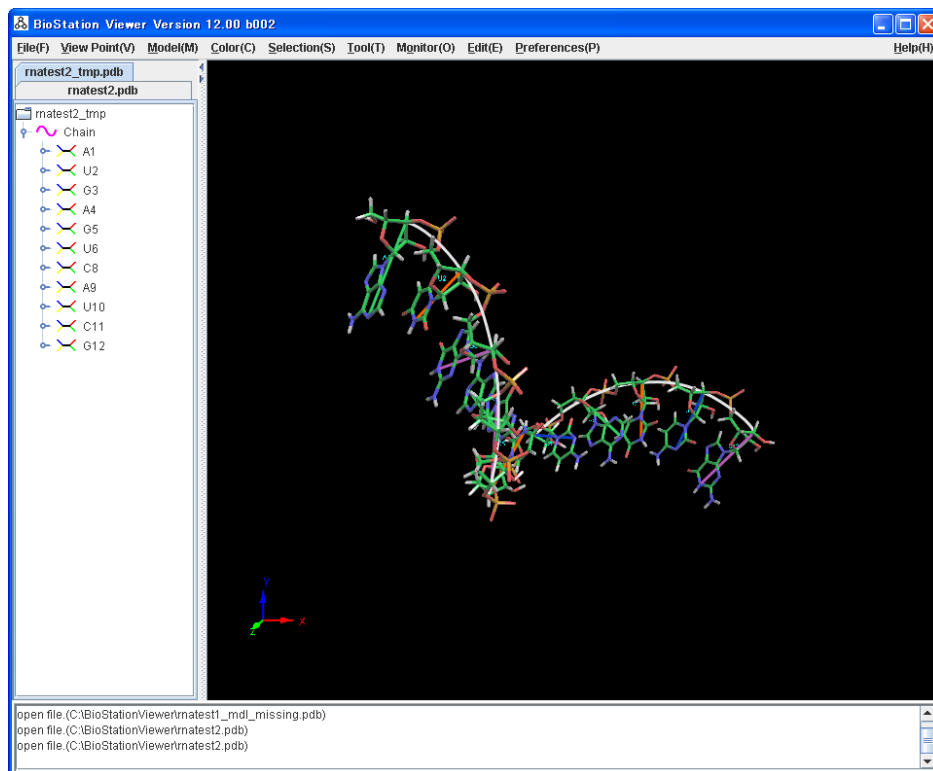


図 2.176 塩基補完した RNA 構造を BioStationViewer へ反映

## 3 使用例

### 3.1 ABINIT-MP 計算結果表示

サンプルデータを使用して、各種表示を行います。サンプルデータは

- (Gly)<sub>10</sub> のサンプルデータ
  - FMO-HF/STO-3G 計算の check point file g10a.cpf
  - 電子密度を計算する入力データ den.inp
  - 電子密度のグリッドデータ g10a\_fmo\_sto-3g\_3.den
  - 電子密度上の静電ポテンシャルマップカデータ g10a\_fmo\_sto-3g\_3.map
  - 静電ポテンシャルのグリッドデータ g10a\_fmo\_sto-3g\_4.esp
  - 分子軌道のグリッドデータ g10a\_fmo\_sto-3g\_3.mo
  - 領域表示例データファイル g10a\_grid.mol2
  - 電場ベクトルデータファイル g10a\_fmo\_sto-3g\_3.efv

です。

#### 3.1.1 分子構造表示

Viewer を起動して、g10a.cpf を読み込みます。ファイルを読み込んだ画面を図 3.1 に示します。起動時の分子構造の表示形式はスティックになっています。

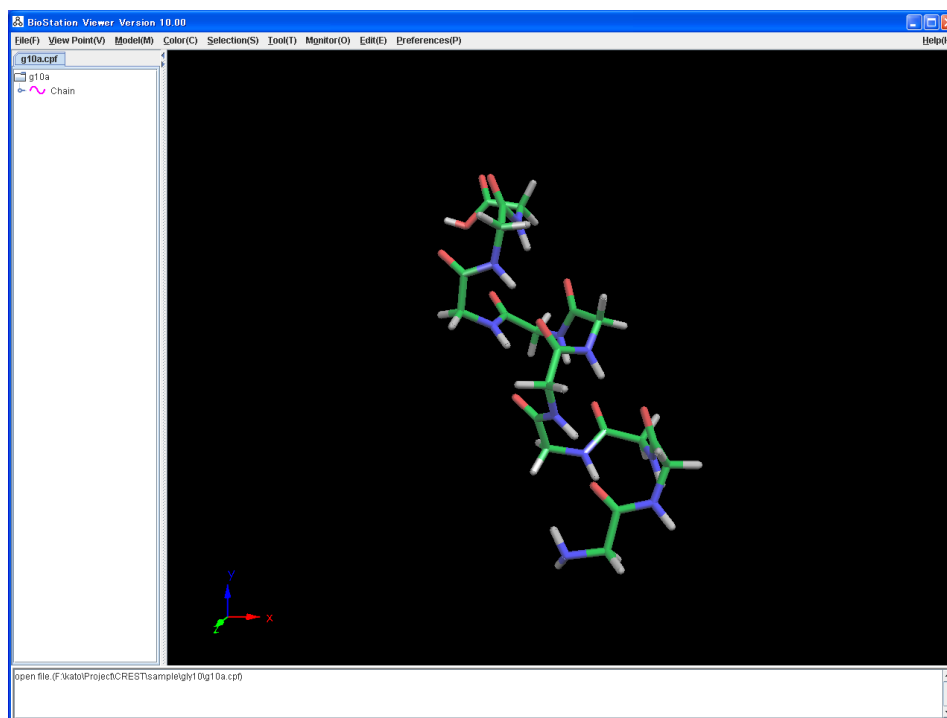


図 3.1 g10a.cpf を読み込んだ画面

Model(ATOM)メニューより、Wire frame ,Wire frame(with fragment bond)(Color を frame に指定),Ball&Stick, Ball&Wire,CPK, Backbone,C α (line)を選択して表示形式を変更して表示します。表示結果を図 3.2~3.8 に示します。

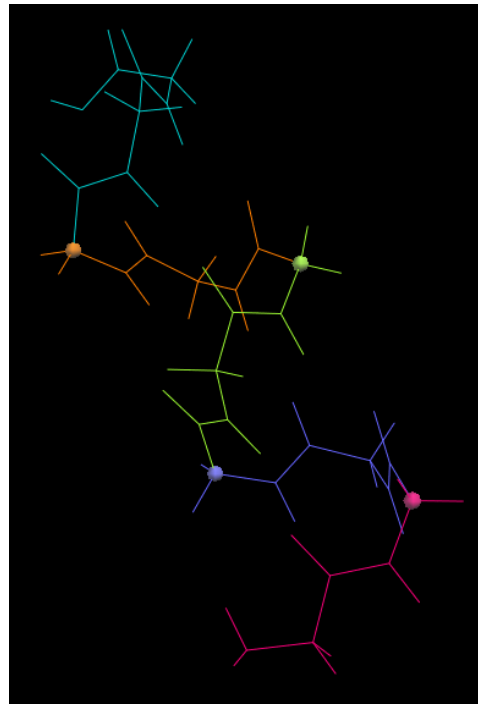
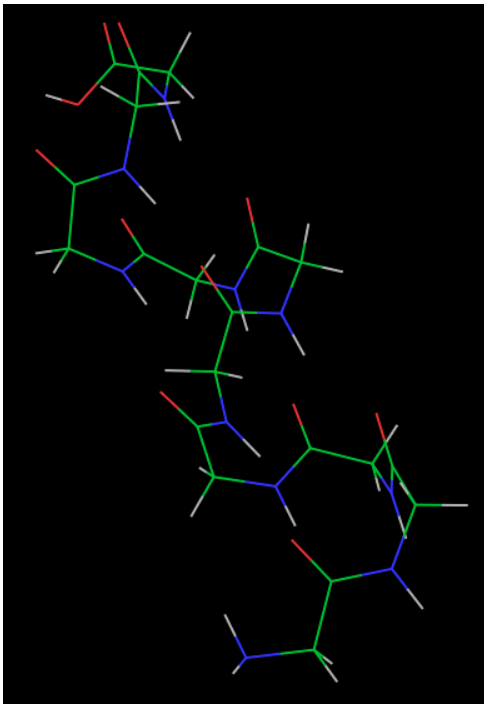


図 3.2 ワイヤーフレーム形式 図 3.3 ワイヤーフレーム形式(フラグメント境界付)形式

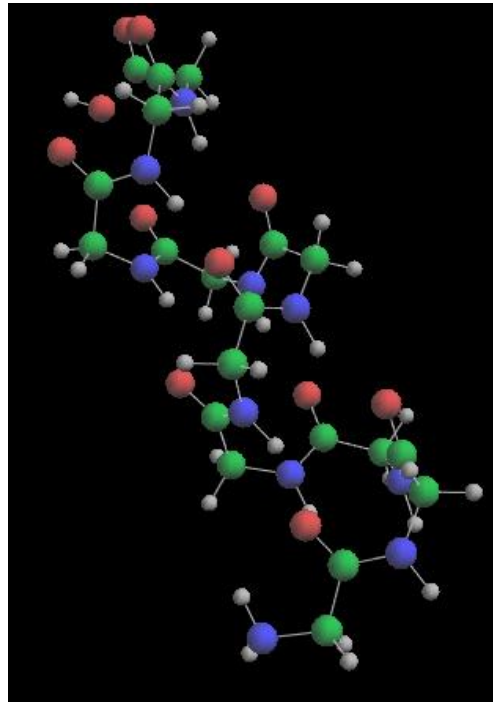
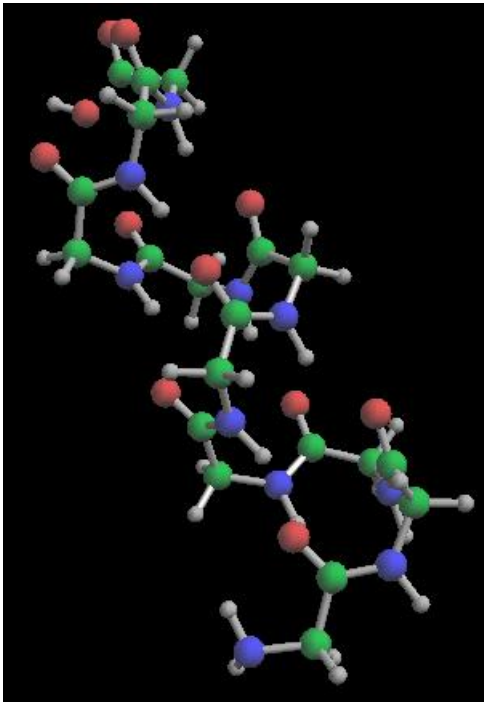


図 3.4 ボールアンドスティック形式

図 3.5 ボールアンドワイヤー形式



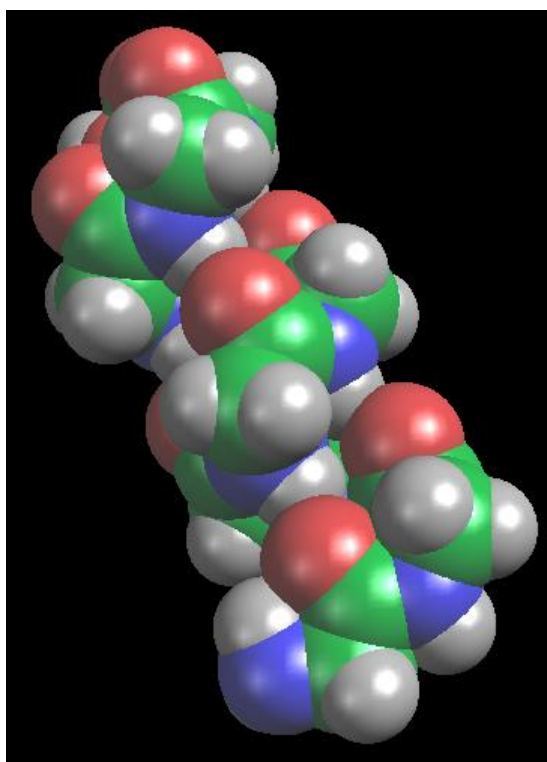


图 3.6 CPK 形式

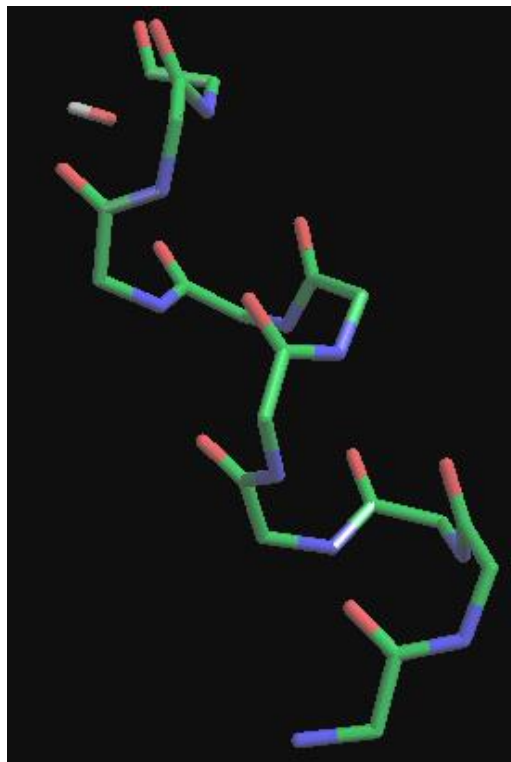


图 3.7 backbone 形式

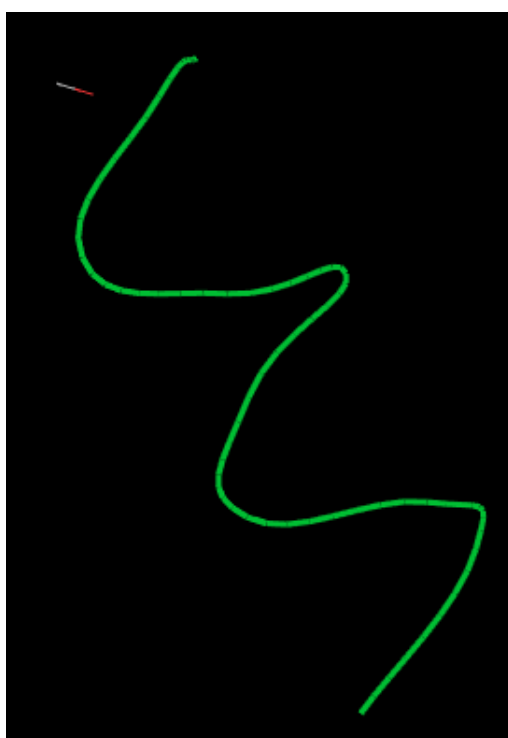


图 3.8 C $\alpha$ Line 形式

### 3.1.2 色付けを変更した表示

Color メニューより、Atom, Residue(Name), Charged Residue, Atom Charge, Frangment, Chain を選択して表示色を変更して表示します。表示結果を図 3.9~3.13 に示します。

なお、Model(ATOM)メニューでは Stick を設定しています。

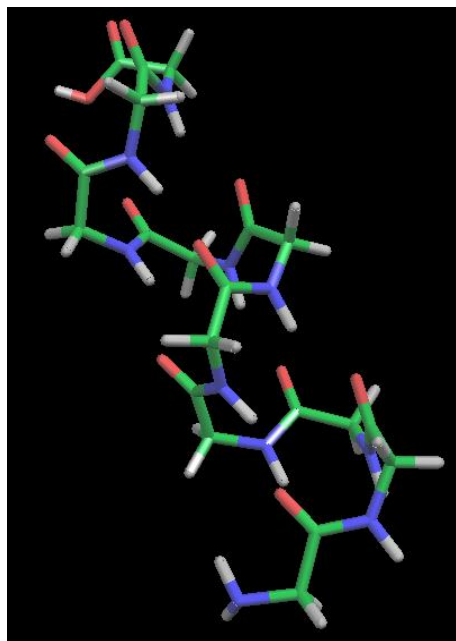


図 3.9 原子の種類で色付け

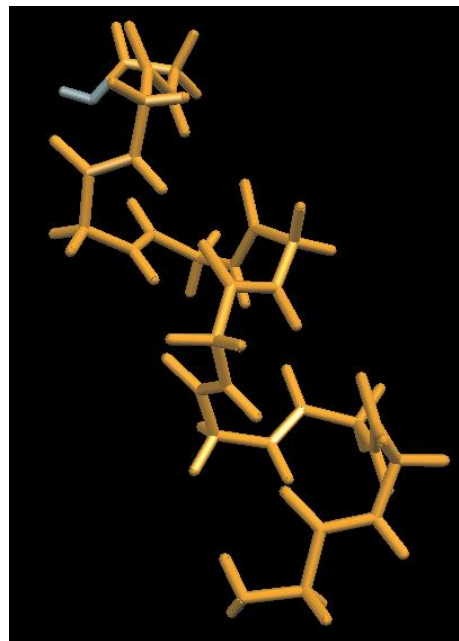


図 3.10 残基の種類で色付け

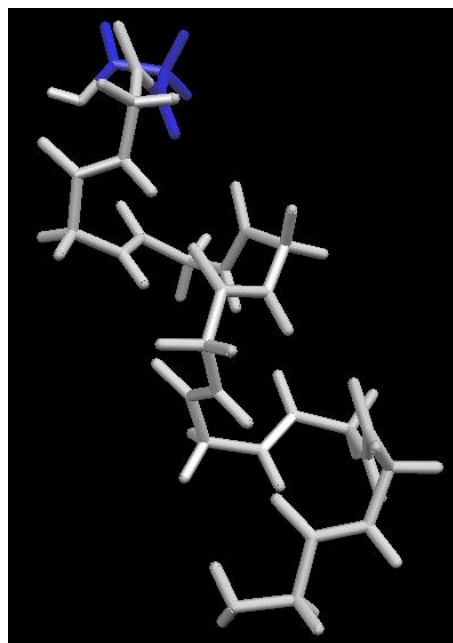


図 3.11 残基の電荷で色付け

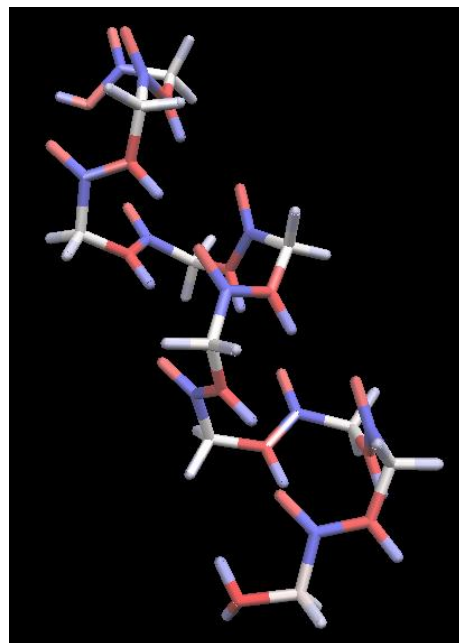


図 3.12 原子の電荷で色付け

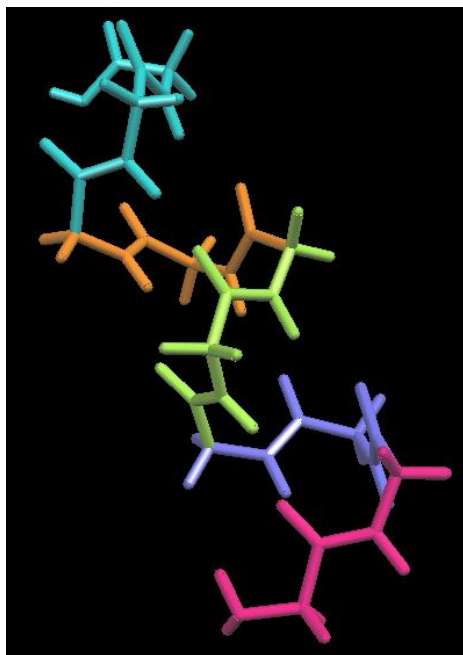


図 3.13 フラグメントで色付け

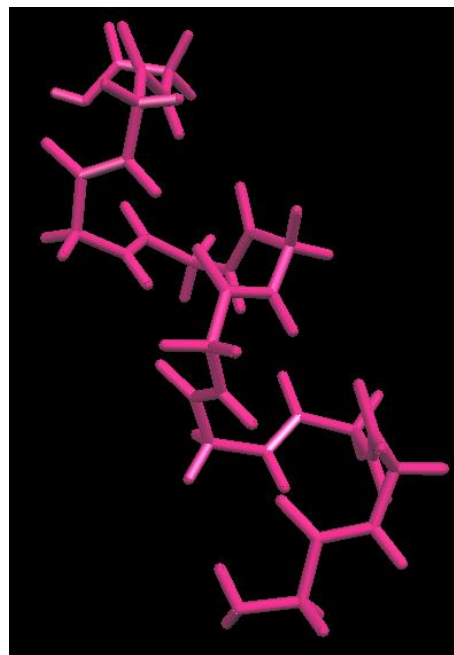


図 3.14 チェーンで色付け(1 チェーンなので 1 色)

フラグメント間相互作用エネルギーを表示するには、基準となる 2 番目のフラグメントを選択し(黄色で表示)、Monitor→Interfragment Interaction→1:1 を選択し、最小値に-5,最大値に 5 を指定しています。表示結果を図 3.15 に示します。フラグメント間相互作用エネルギーの詳細は 3.3 節で詳しく説明します。

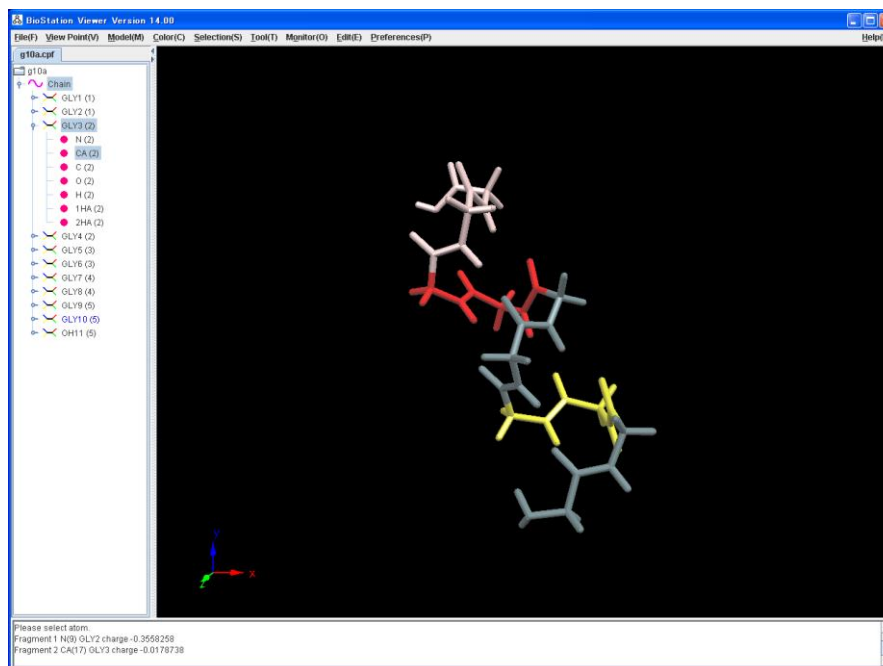


図 3.15 フラグメント間相互作用エネルギーの値で色付け。黄色の 2 番目のフラグメントを基準として表示している。

### 3.1.3 ラベル表示

Tool→Label を選択するとラベル表示画面が表示されます。図 3.16 に残基のラベルを表示した例を、図 3.19 に原子のラベルを表示した例を示します。

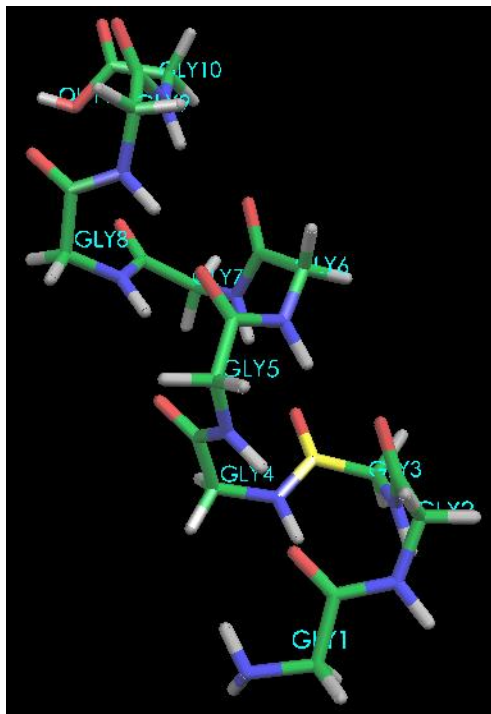


図 3.16 残基のラベル表示例

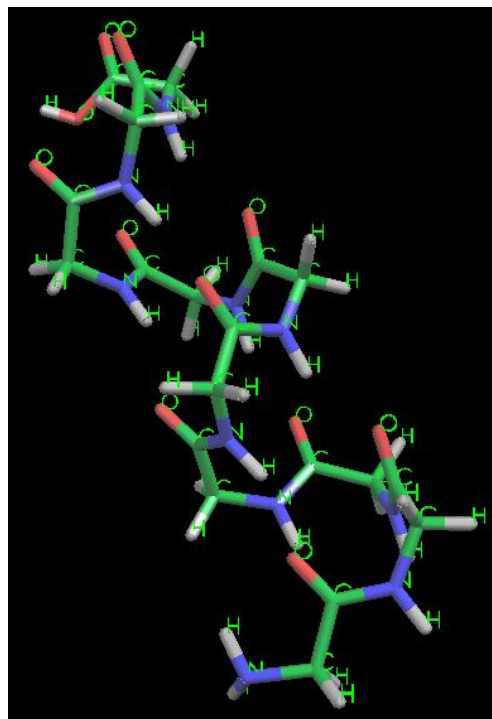


図 3.17 原子のラベル(原子名)表示例

### 3.1.4 電子密度の等値面表示

電子密度の表示を行います。File→Open で g10a\_fmo\_sto-3g\_3.den を指定します。等値面指定画面が表示され、表示する等値面の値はファイルに記述されている値です。このまま Ok をクリックします。すると、電子密度の等値面が表示されます。表示を 図 3.18 に示します。

File→File List を選択すると入力されているファイル一覧が表示されています。ここで、g10a\_fmo\_sto-3g\_3.den の横の Value ボタンをクリックします。等値面指定画面が表示されるので、色を変更します。Color の横のボタンをクリックするとカラー選択画面が表示されます。ここで適当な色を選択します。表示を 図 3.19 に示します。

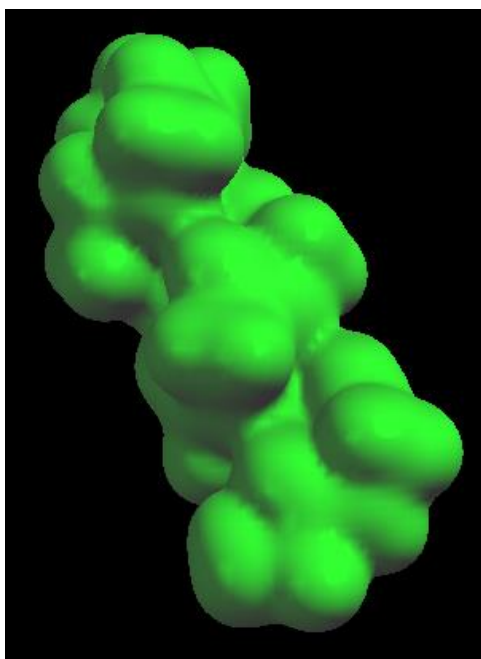


図 3.18 等値面表示

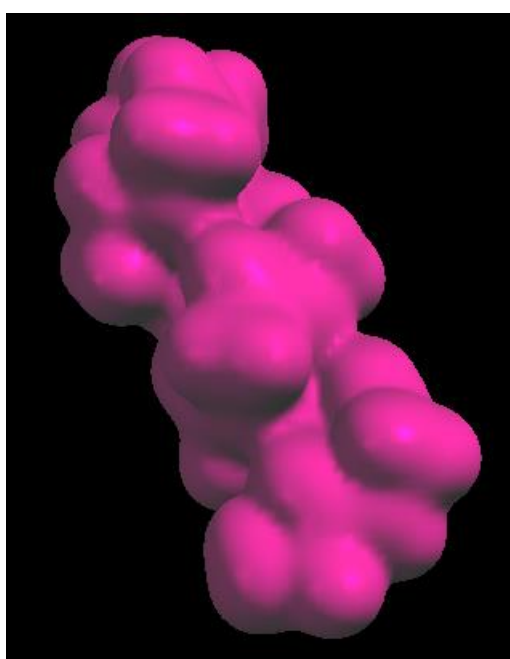


図 3.19 色を変更した等値面表示

File→Close File を選択すると入力されているファイル一覧が表示されています。ここで、g10a\_fmo\_sto-3g\_3.den を選択肢 Ok ボタンをクリックします。表示から等値面が削除されます。

### 3.1.5 電子密度の等値面上に静電ポテンシャルの値により色付けした表示

電子密度の等値面上に静電ポテンシャルの値により色付けした表示を行います。File→Open で g10a\_fmo\_sto-3g\_3.map を指定します。静電ポテンシャル指定画面が表示されます。Min Max を-0.05 0.05 に設定します。Ok をクリックすると、電子密度の等値面が表示されます。表示を図 3.20 に示します。

等値面の透明度を変更します。File→File List を選択すると入力されているファイル一覧が表示されています。ここで、g10a\_fmo\_sto-3g\_3.mapの横の Value ボタンをクリックします。静電ポテンシャル指定画面が表示されるので、Transparency を 50 に変更します。また、Color→Atom Charge を選択します。表示を図 3.21 に示します。

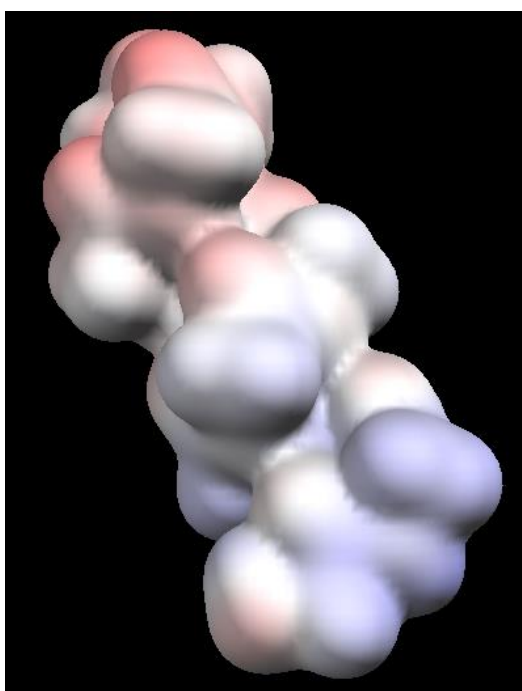


図 3.20 電子密度の等値面上に静電ポテンシャルの値により色付けした表示

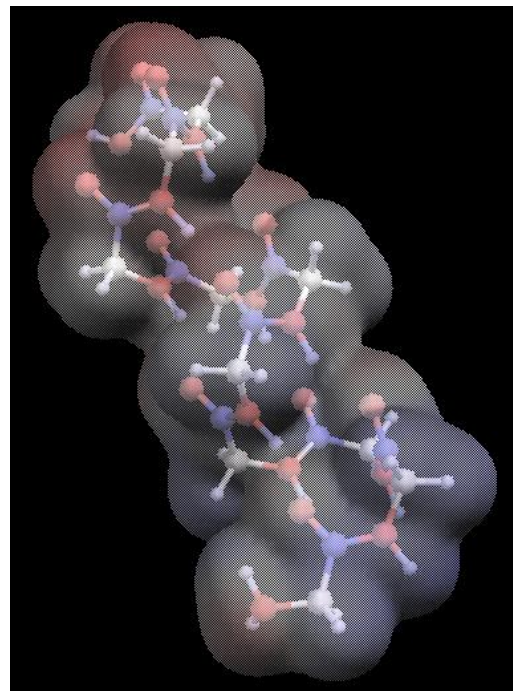


図 3.21 透明度を変更した等値面表示



### 3.1.6 静電ポテンシャルの等値面表示

静電ポテンシャルの等値面表示を行います。File→Open で g10a\_fmo\_sto-3g\_4.esp を指定します。静電ポテンシャル指定画面が表示されます。Min,Max を -0.01,0.01、Transparency を 50 にして Ok をクリックすると、静電ポテンシャルの等値面が表示されます。分子構造を Stick で合わせて表示した例を図 3.22 に示します。

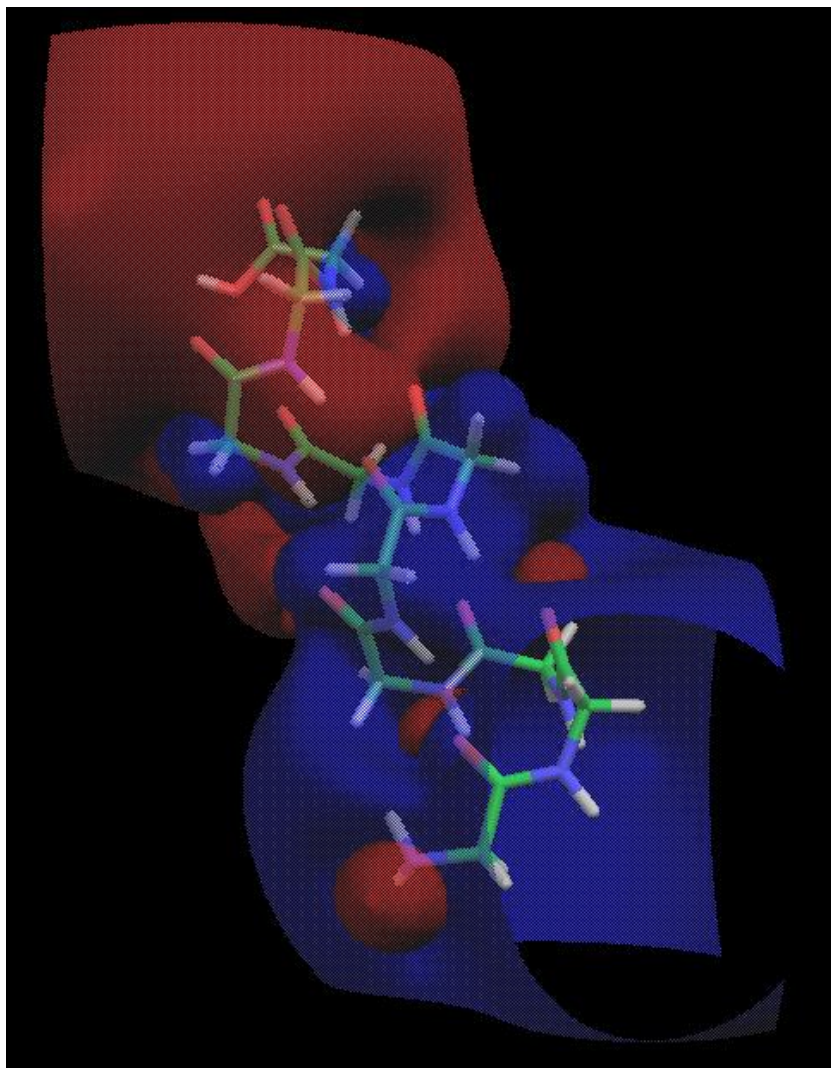


図 3.22 静電ポテンシャルの等値面表示

### 3.1.7 分子軌道の等値面表示

分子軌道の等値面表示を行います。File→Openでg10a\_fmo\_sto-3g\_3.moを指定します。分子軌道指定画面が表示されます。ここで、グラフより表示したい軌道を選択し、Drawをクリックすると、電子密度の等値面が表示されます。この例では1番目のフラグメントのLUMOの等値面を表示しています。表示を図3.23に示します。

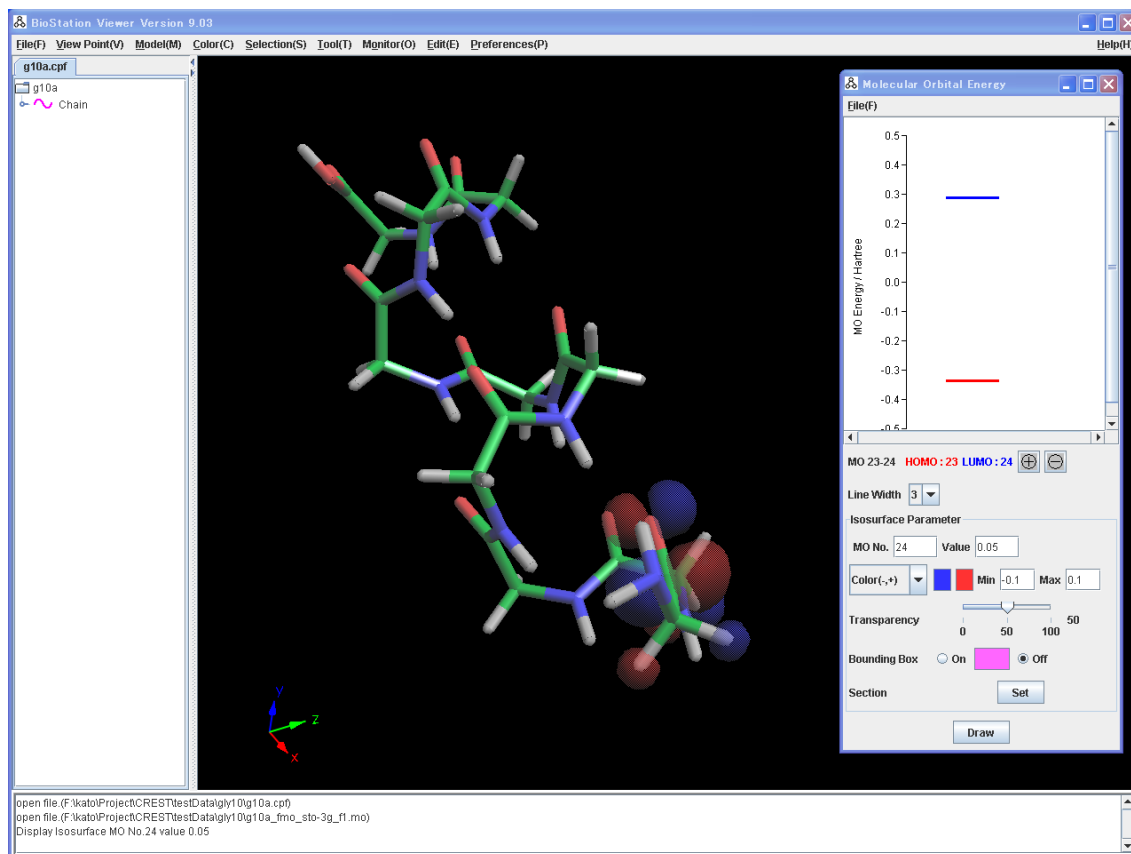


図 3.23 分子軌道の等値面表示



### 3.1.8 電場ベクトルの表示

電場ベクトルの表示を行います。File→Open で g10a\_fmo\_sto-3g\_3.efv を指定します。デフォルトの電場ベクトルが表示されます(図 3.24)。

次に表示形式を変更して表示する例を示します。Min,Max の値を-0.1,0.1 にします。断面指定をするため、Section→Set ボタンを押下し、Assign Section Plane の Angle タブで B を-27 度に設定して、Value は Density を指定して"Draw"ボタンをクリックすると断面が表示されます。表示指定を図 3.25 に、表示を図 3.26 に示します。

構造表示形式を Ball&Stick、電場ベクトルの透明度を 50、表示形式を Min,Max の値を-0.02,0.02、Stick、ステップ数を 150 にし"Draw"ボタンをクリックすると Stick 形式の電場ベクトルが表示されます。ステップ数を増やしたので、下のほうの+のグリシンから、上の-のグリシンへ電場ベクトルが表示されます。表示指定を図 3.27 に、表示を図 3.28 に示します。

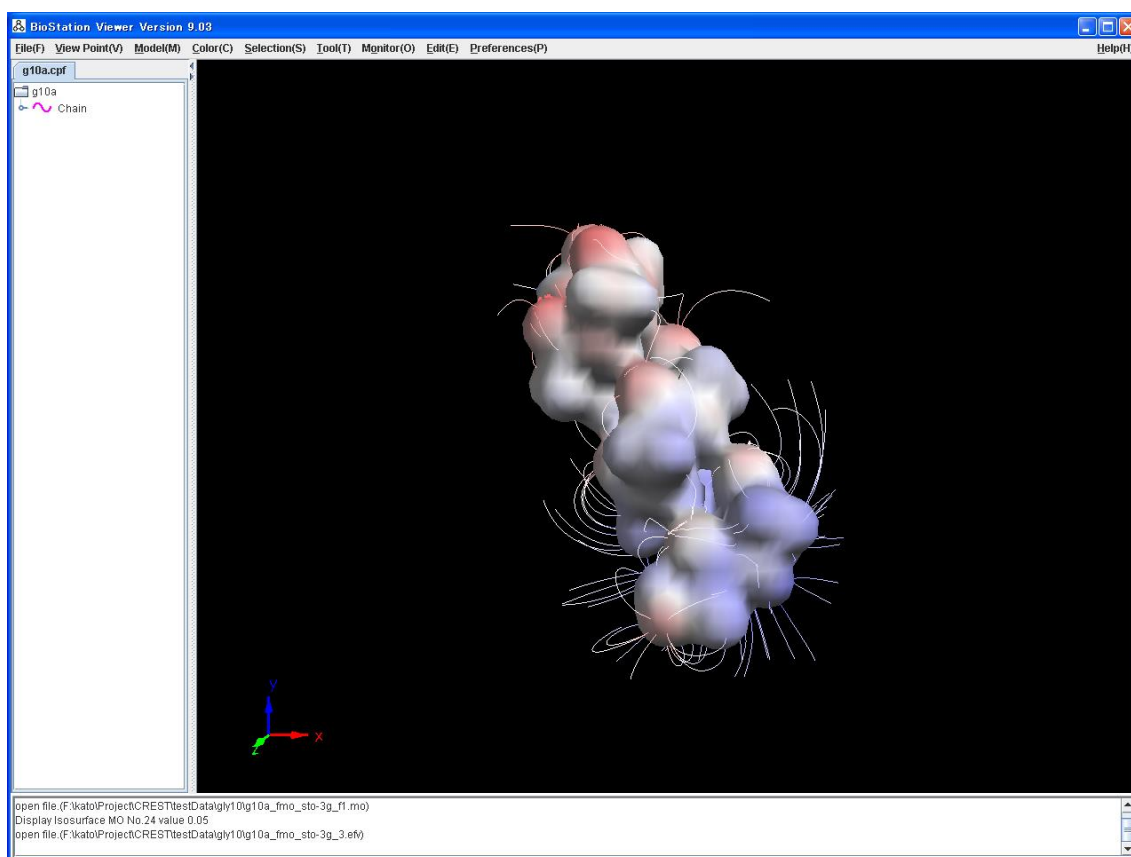


図 3.24 電場ベクトルの表示

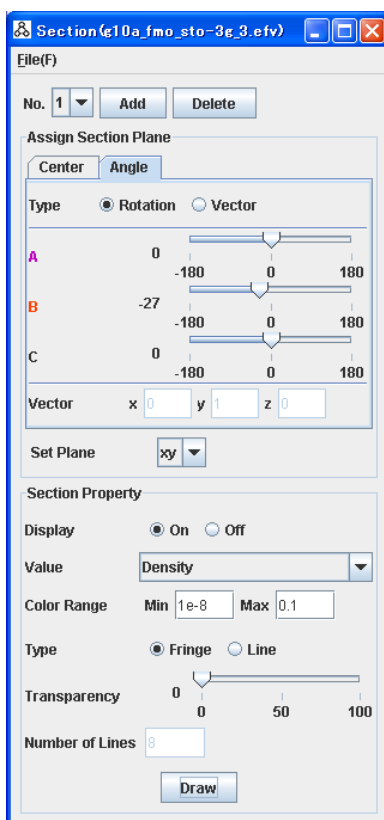


図 3.25 断面の表示指定

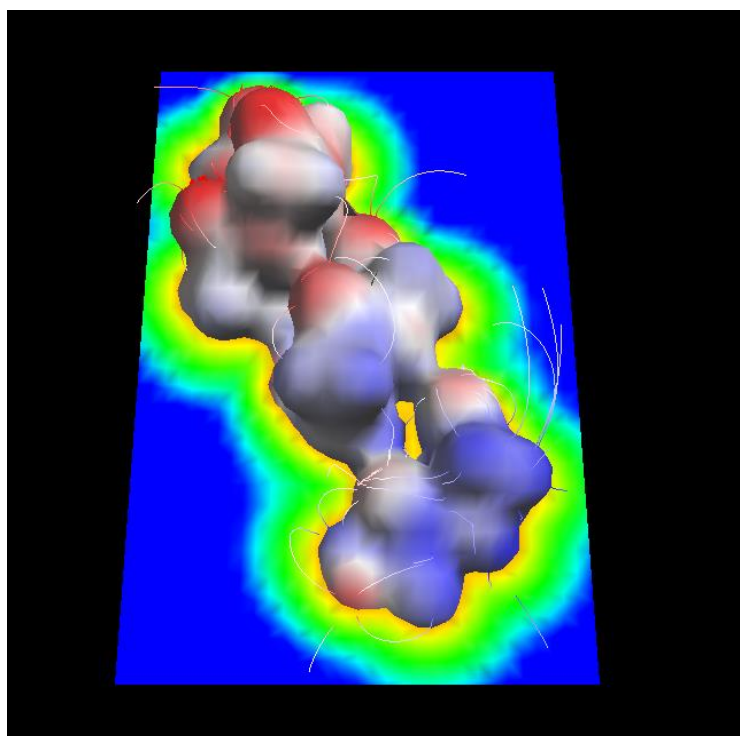


図 3.26 断面の表示

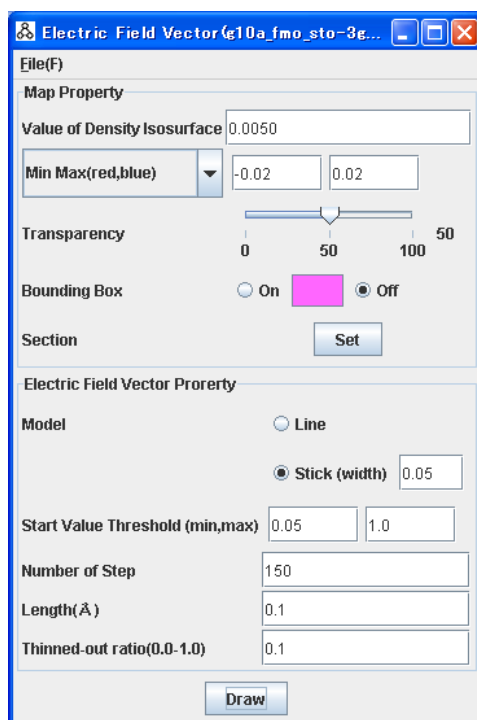


図 3.27 電場ベクトルの表示指定

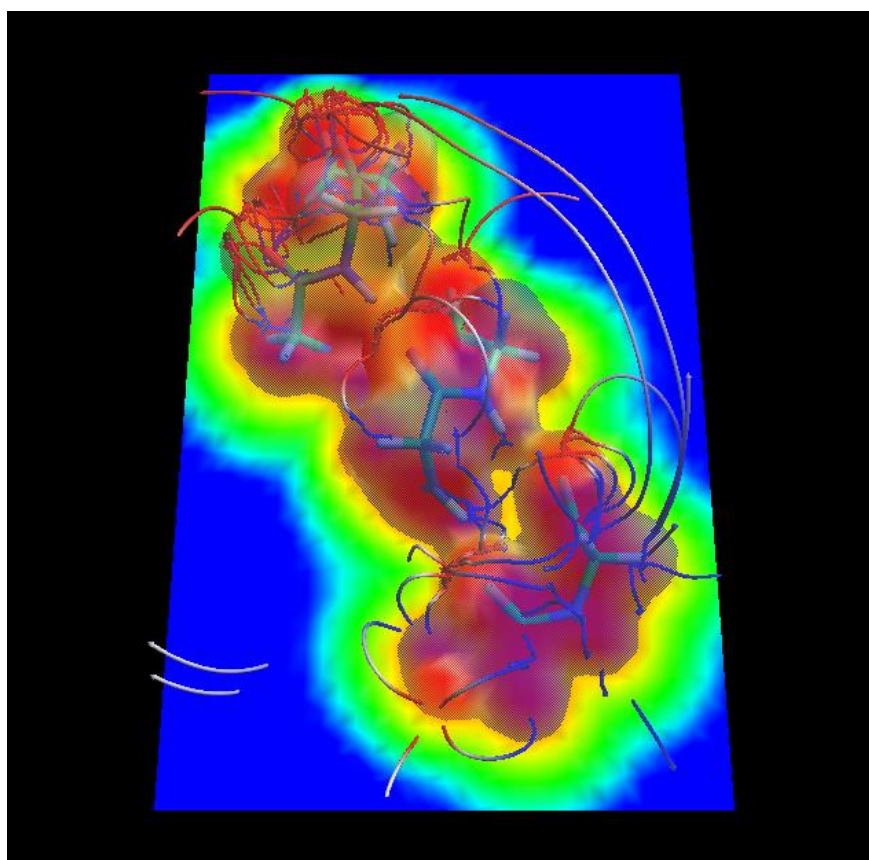


図 3.28 Stick 形式での電場ベクトル表示

### 3.2 エストロゲン受容体ーリガンド複合体の構造表示例

サンプルデータを使用して、各種表示を行います。サンプルデータ(フォルダ sample にあります)には、エストロゲン受容体ーリガンド複合体を用います。リガンドとしてアゴニストである  $17\beta$ -estradiol と選択的アンタゴニスト raloxifene が結合した場合のpdbファイル ERE\_EST.pdb、ERR\_RAL.pdb を使用します。

#### 3.2.1 ペプチド鎖の $C\alpha$ line 表示

Viewerを起動して、ERE\_EST.pdbを読み込むと、デフォルトの設定で、Model(Atom)→Off、Model(Structure)→ $C\alpha$  Line で表示されます。ファイルの読み込みはドラッグでも可能です。色は、2次構造の種別で表示されます。表示を図 3.29 に示します。その他の形式の表示例は図 2.24ー図 2.30 を参照してください。

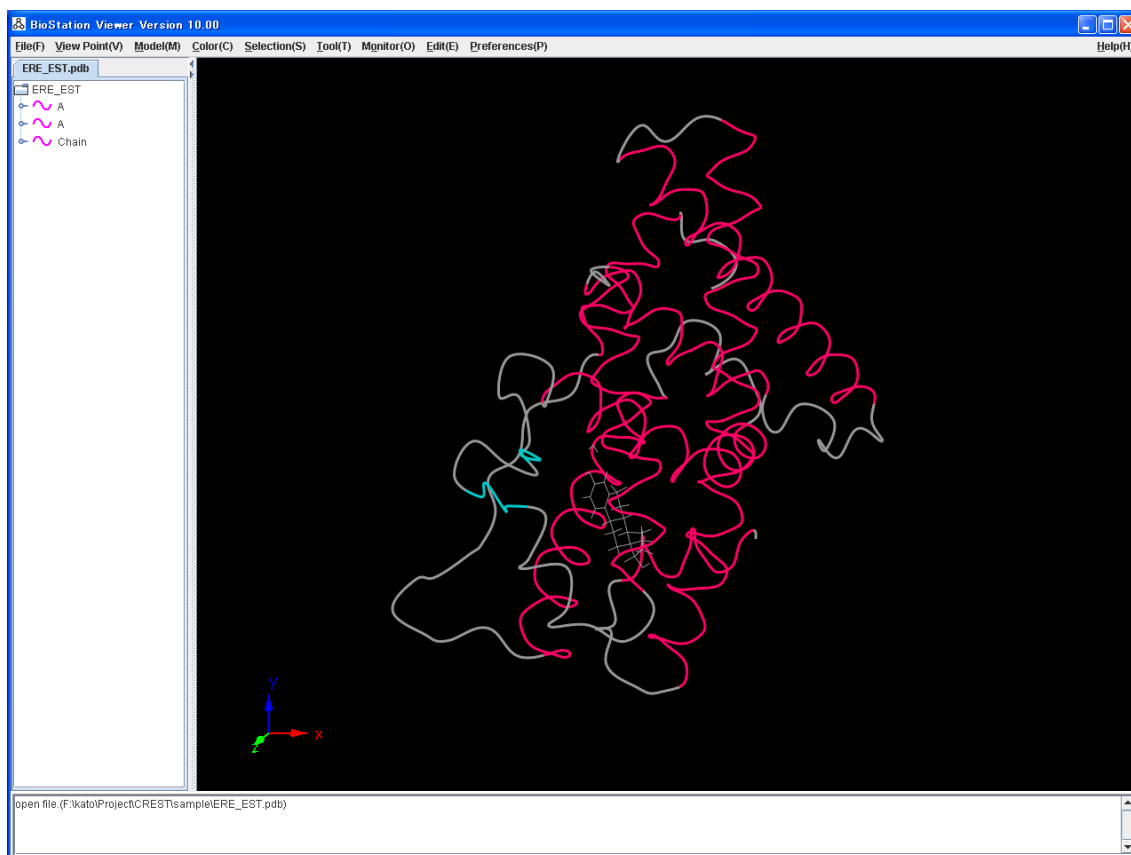


図 3.29 ファイル読み込み後の表示

### 3.2.2 ペプチド鎖の C $\alpha$ line 表示+リガンド表示形式変更

Selection→Residue を選択し、リガンドをマウスの左ボタンでクリックします。クリックされたリガンドが強調表示された画面を図 3.30 に示します。

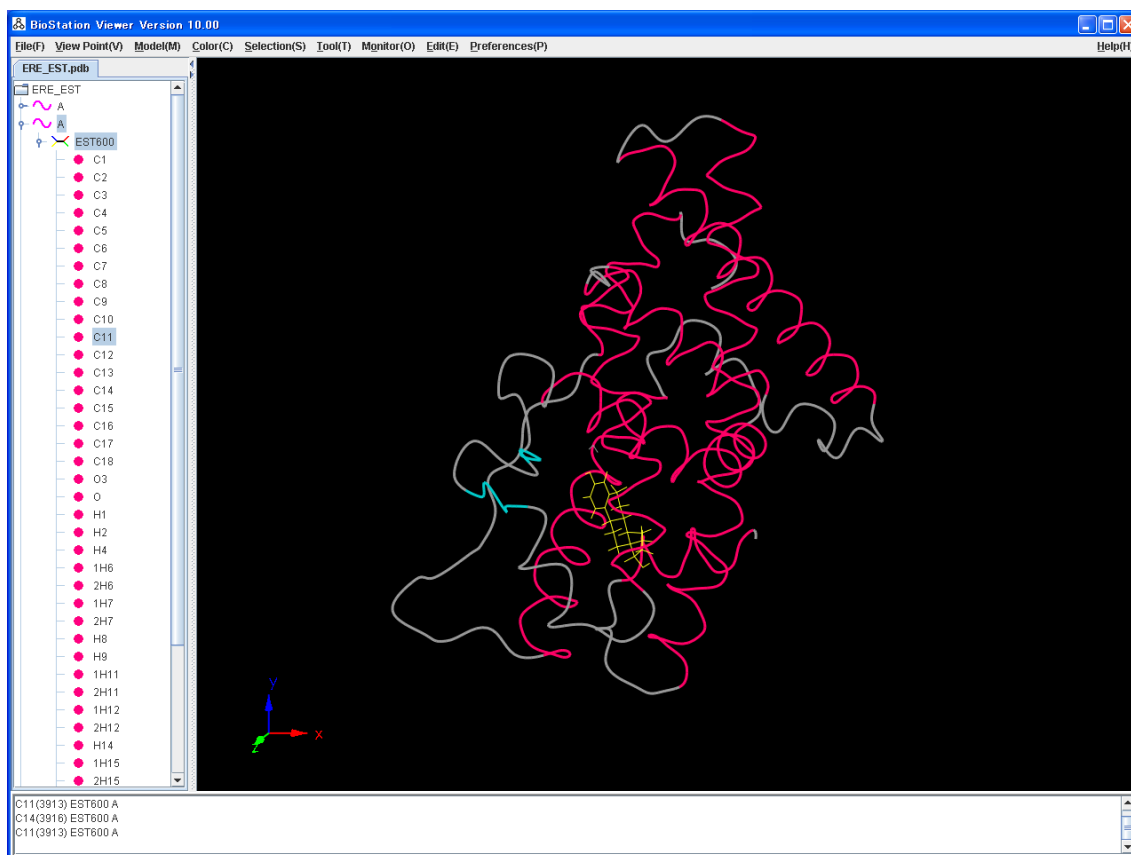


図 3.30 リガンド選択

次に、右ボタンでリガンドをクリックします。すると残基表示指定画面が表示されますので Color : Atom 、 Model : Ball&Stick を選択し Ok をクリックします (図 3.31)。これで、リガンドがボールアンドスティック形式で表示されます。表示を図 3.32 に示します。

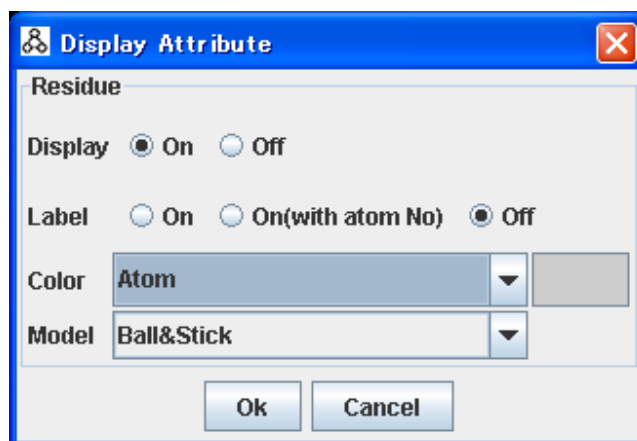


図 3.31 リガンドの表示形式指定画面

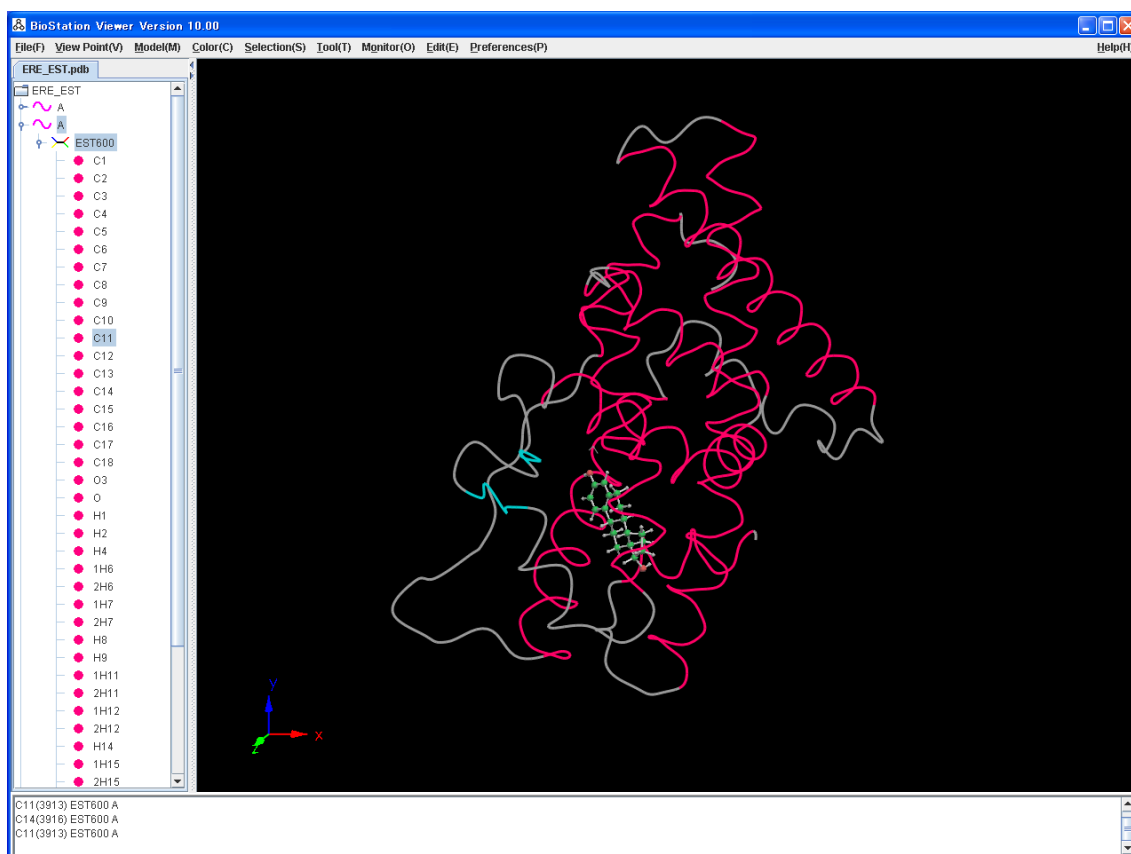


図 3.32 リガンドをボールアンドスティック形式で表示

次に、リガンドを右クリックし残基表示指定画面でModelの項目はCPKを選択し、Colorの項目はotherにし、横のボタンをクリックし、適当な色を選択します。リガンドが空間充填モデル形式で指定した色で表示されます。表示を図 3.33 に示します。

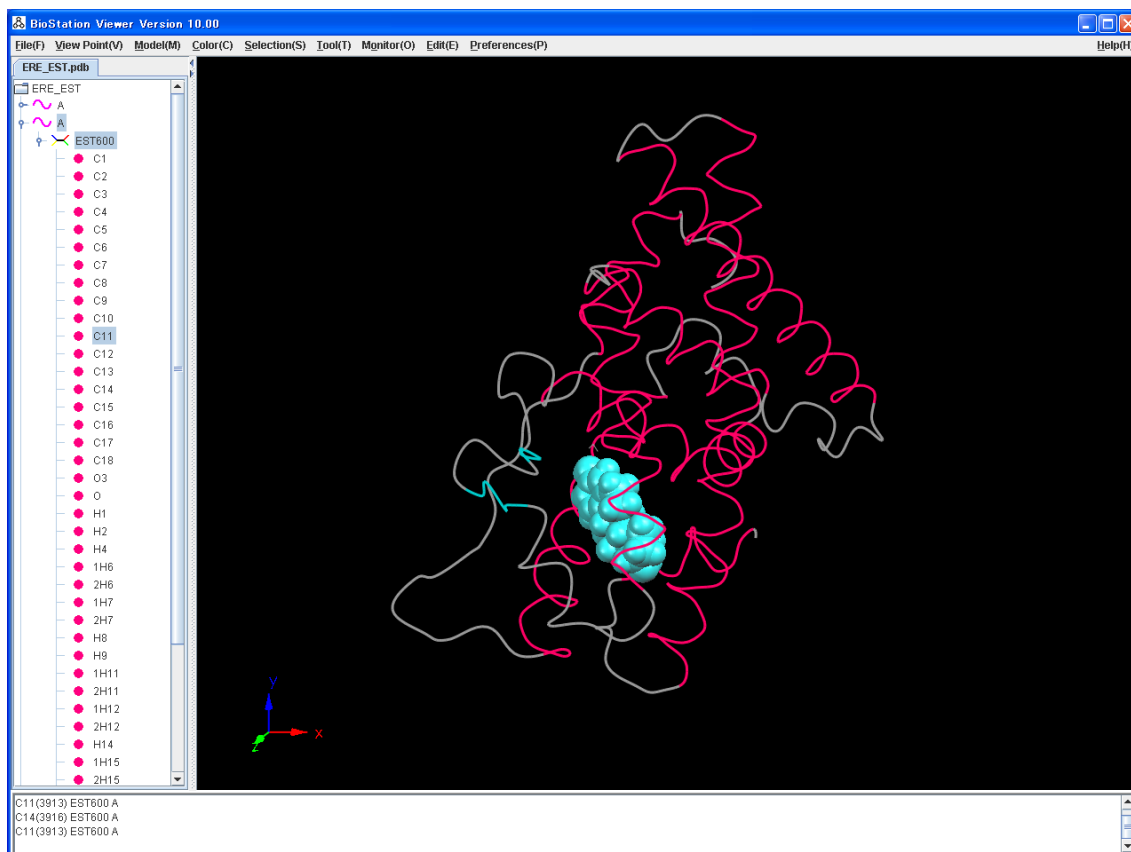
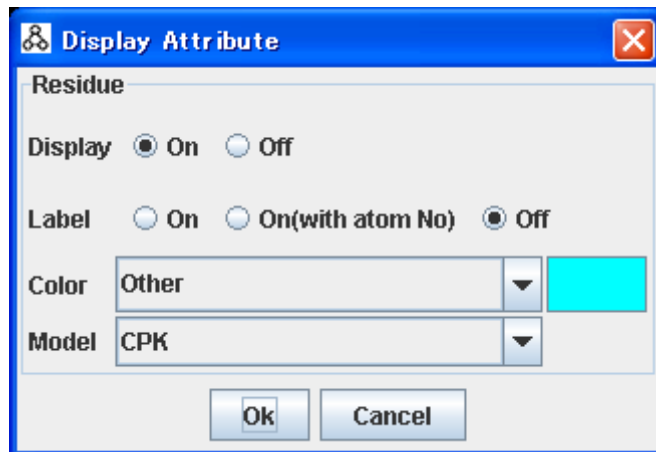


図 3.33 リガンドを空間充填モデル形式で表示

### 3.2.3 ペプチド鎖の C $\alpha$ line 表示+リガンド表示+選択した残基の表示

リガンド周辺の残基を Wire Frame で表示します。シフトを押しながら左ボタンで 5 つほどリガンド周辺の残基(この例では ASN519~GLU523)をクリックします。シフトを押しながら右ボタンそのひとつをクリックします。残基表示指定画面が表示されますので Color:Atom、Model:Wire Frame を選択し Ok をクリックします。これで、選択された残基がワイヤーフレーム形式で表示されます。表示を図 3.34 に示します。

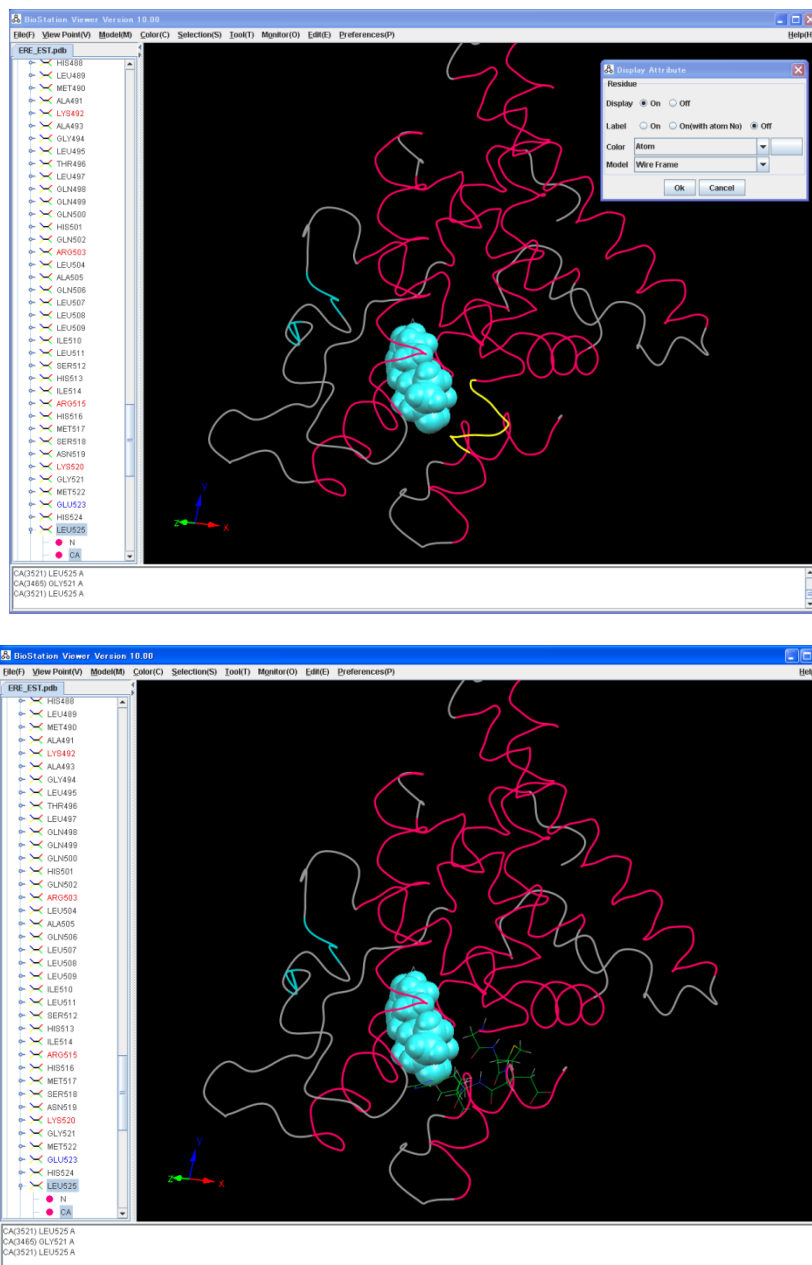



図 3.34 選択した残基のワイヤーフレーム形式表示



次に **Tree** 図からの指定で表示を変更します。リガンド周辺の残基をクリックします。**Tree** 図に選択された残基が強調表示されますので、残基名の横の  マークをクリックし残基の展開を閉じ、もう一度この残基をクリックし 5 個下の残基をシフトを押しながらクリックします(この例では GLY420~PHE425)。これで、複数の残基が選択されます。次に右ボタンで選択された残基をクリックします。残基表示指定画面が表示されますので **Color:Atom**、**Model:Wire Frame** を選択し **Ok** をクリックします。これで、選択された残基がワイヤーフレーム形式で表示されます。表示を図 3.35 に示します。

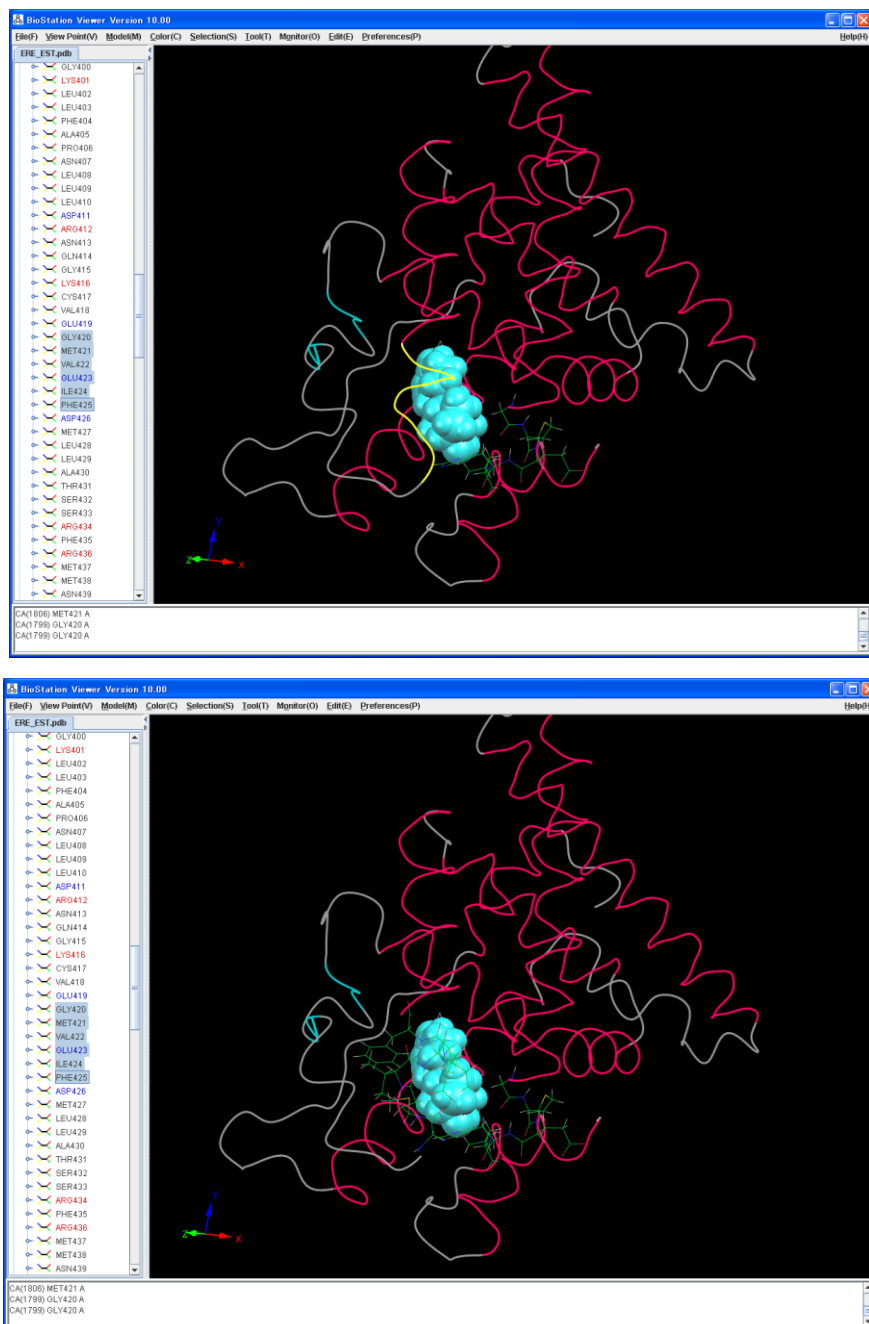


図 3.35 **Tree** 図上で選択した残基のワイヤーフレーム形式表示

### 3.2.4 リガンド+荷電残基表示

Model(Atom)→Wire Frame, Model(structure)→Offで全体をWire Frameで表示します。Tool→Display Selected Residueを選択します。残基表示有無指定画面が表示されますので、Unselect Allをクリックし、荷電残基(ASP, GLU, LYS, ARG)を選択します。すると指定された荷電残基のみ表示されます。表示を図 3.36 に示します。同様に、任意の指定残基のみを表示することができます。

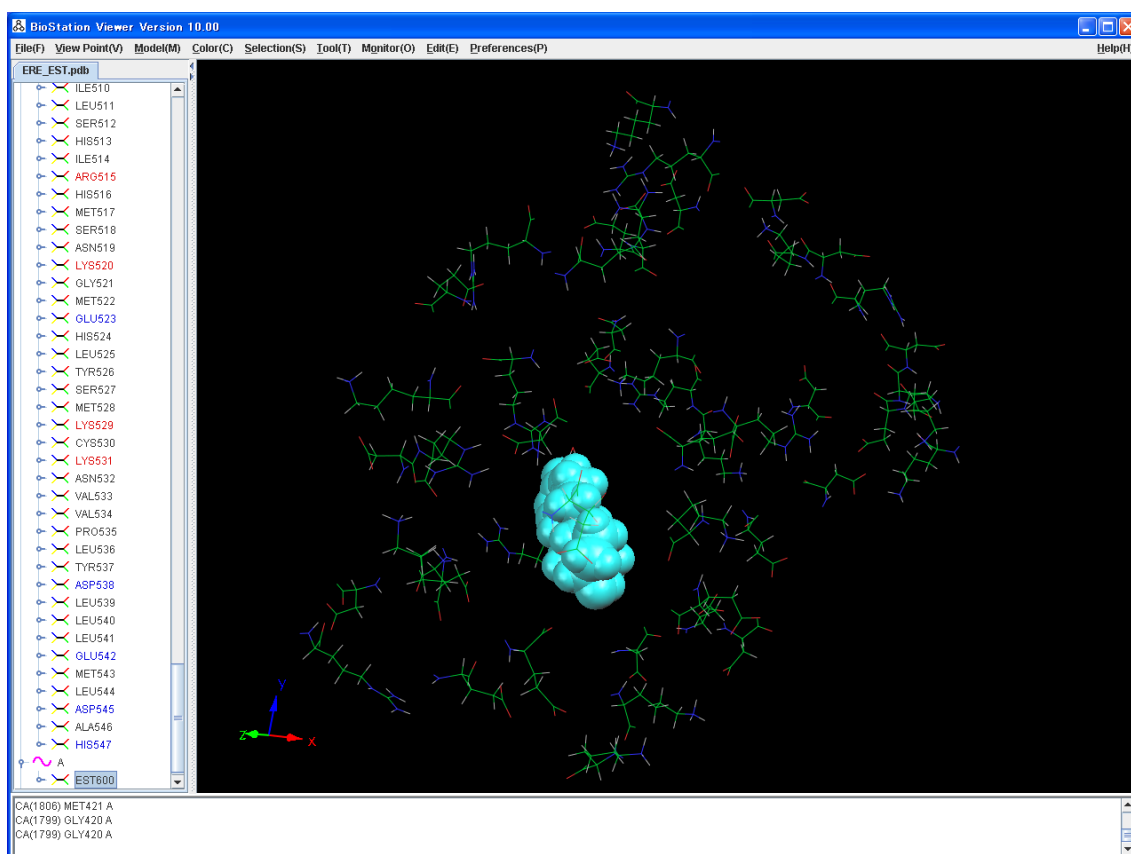


図 3.36 荷電アミノ酸の表示

Color(Atom)→Charged Residue を選択すると、表示されている残基が荷電の値により色付けされます。正電荷が赤、負電荷が青で表示されます。表示を図 3.37 に示します。

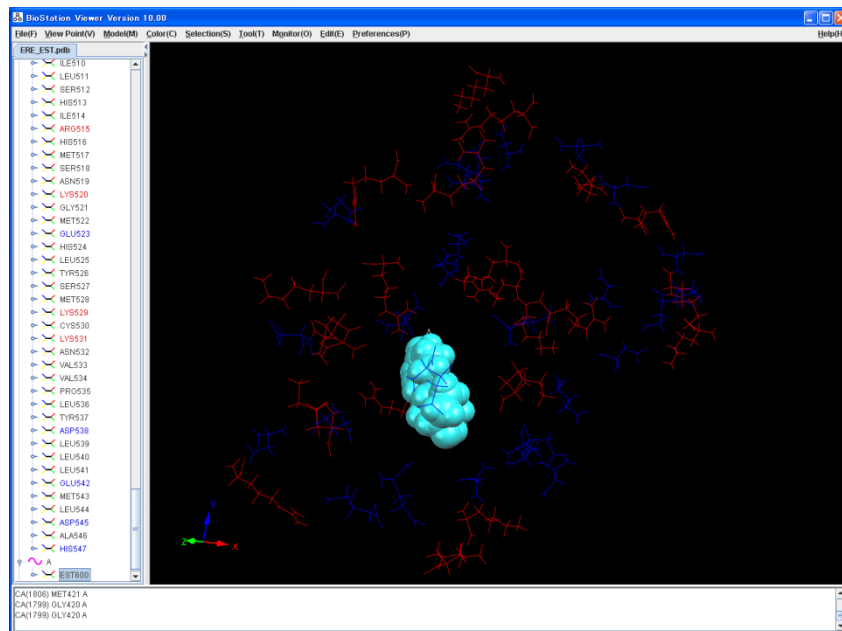


図 3.37 荷電アミノ酸で色付けした表示

Tool→Display Selected Residue を選択します。残基表示有無指定画面が表示されますので、Select All をクリックします。残基の表示指定が解除され全体が表示されます。表示を図 3.38 に示します。

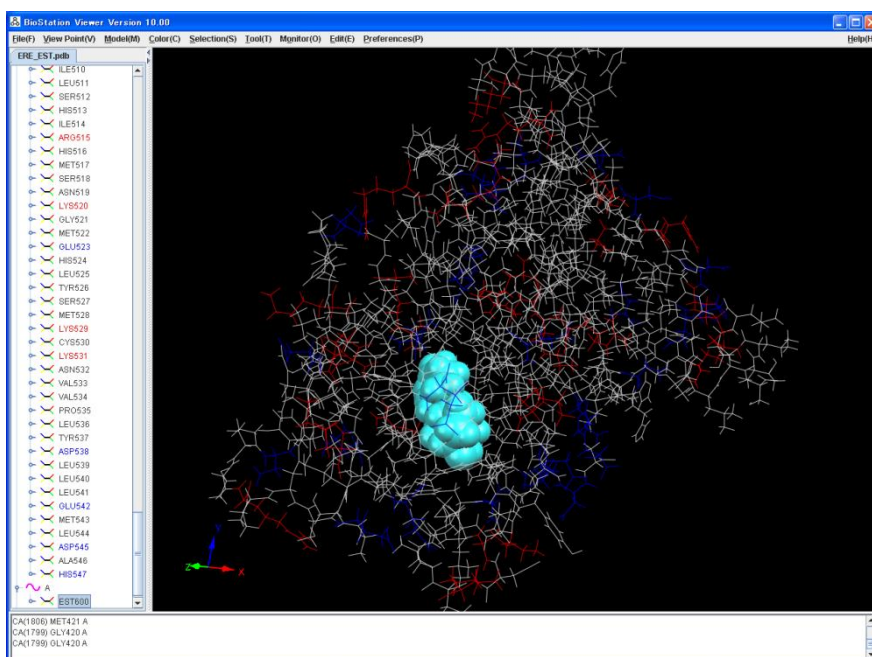


図 3.38 荷電アミノ酸で全体を色付けした表示

### 3.2.5 リガンド周辺表示と距離表示

リガンドから指定した距離内の原子を表示します。リガンドをクリックし選択し、Tool→Display Atom in Distance を選択します。距離指定の画面が表示されますので、From selected で Residue を選択し、Distance に4と入力します。するとリガンドから距離4Å以内の原子が表示されます。表示を図 3.40 に示します。ここで、リガンドの真ん中のあたりの原子をクリックして Tool→Set Rotation Center を選択します。すると、回転中心が選択された原子になるので、表示の移動がやりやすくなります。

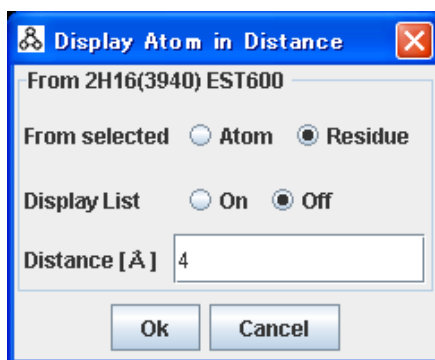


図 3.39 指定範囲内の原子の表示の指定画面

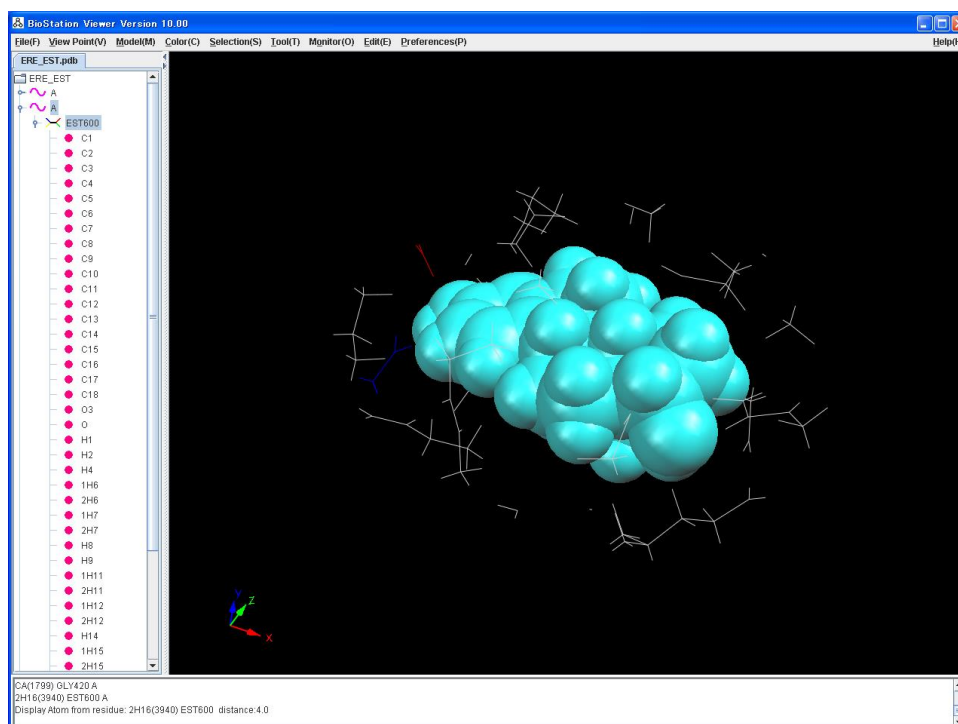


図 3.40 リガンドから指定距離内の表示

次に、原子間の距離を表示します。Color(Atom)→Atom を選択し、全体を原子で色付けし、リガンドを右ボタンクリックし残基表示指定で、Ball&Stick、原子で色付けを指定します。ここで、Monitor→Distance を選択します。リガンドの端の水素原子をクリックし、次にその近くの残基上の酸素原子をクリックします。するとメッセージエリアに両原子間の距離が表示されます。表示を図 3.41 に示します。

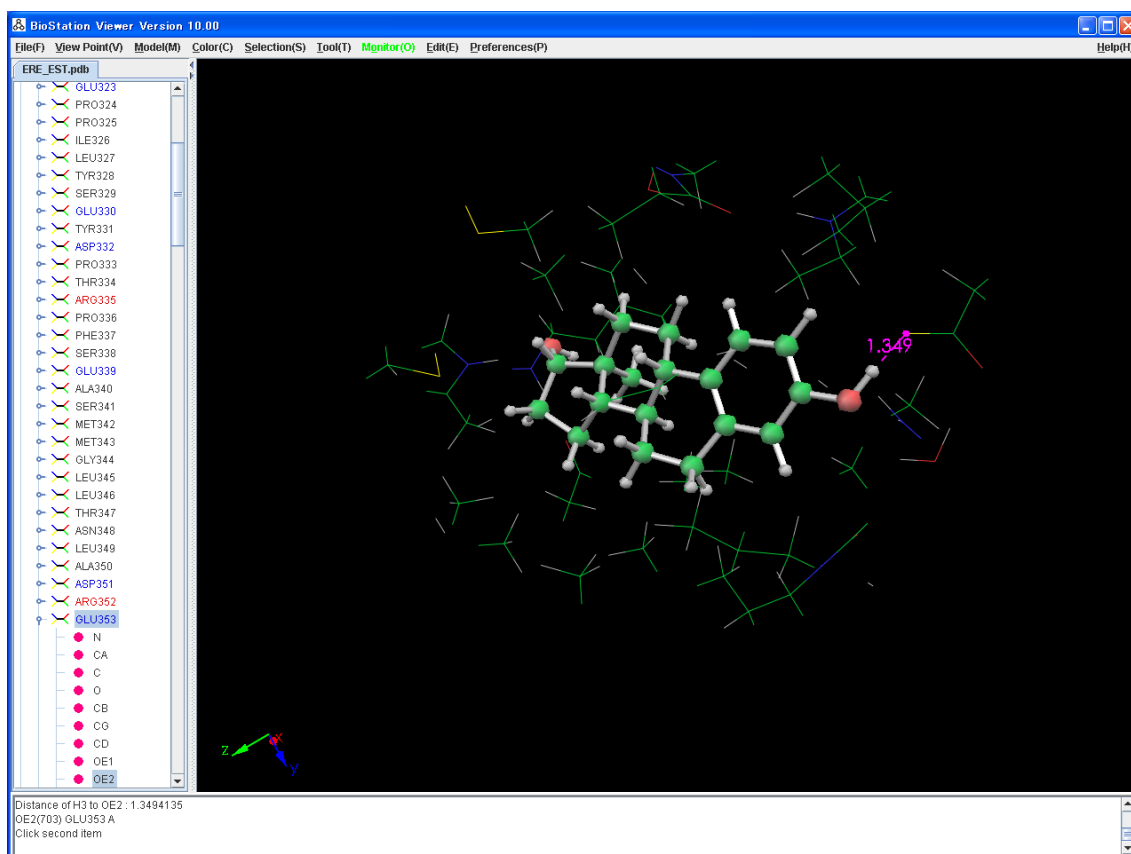


図 3.41 原子間の距離の表示

### 3.3 フラグメント間相互作用エネルギー表示例

エストロゲン受容体ーリガンド複合体の計算結果を使用して、フラグメント間相互作用エネルギーの表示を行います。1 フラグメント=1 残基として計算を行えば、残基間相互作用、残基ーリガンド間相互作用を表示することができます。

#### 3.3.1 ファイル入力

Viewer を起動して、ERE\_EST.cpf を読み込み表示します。表示を図 3.42 に示します。

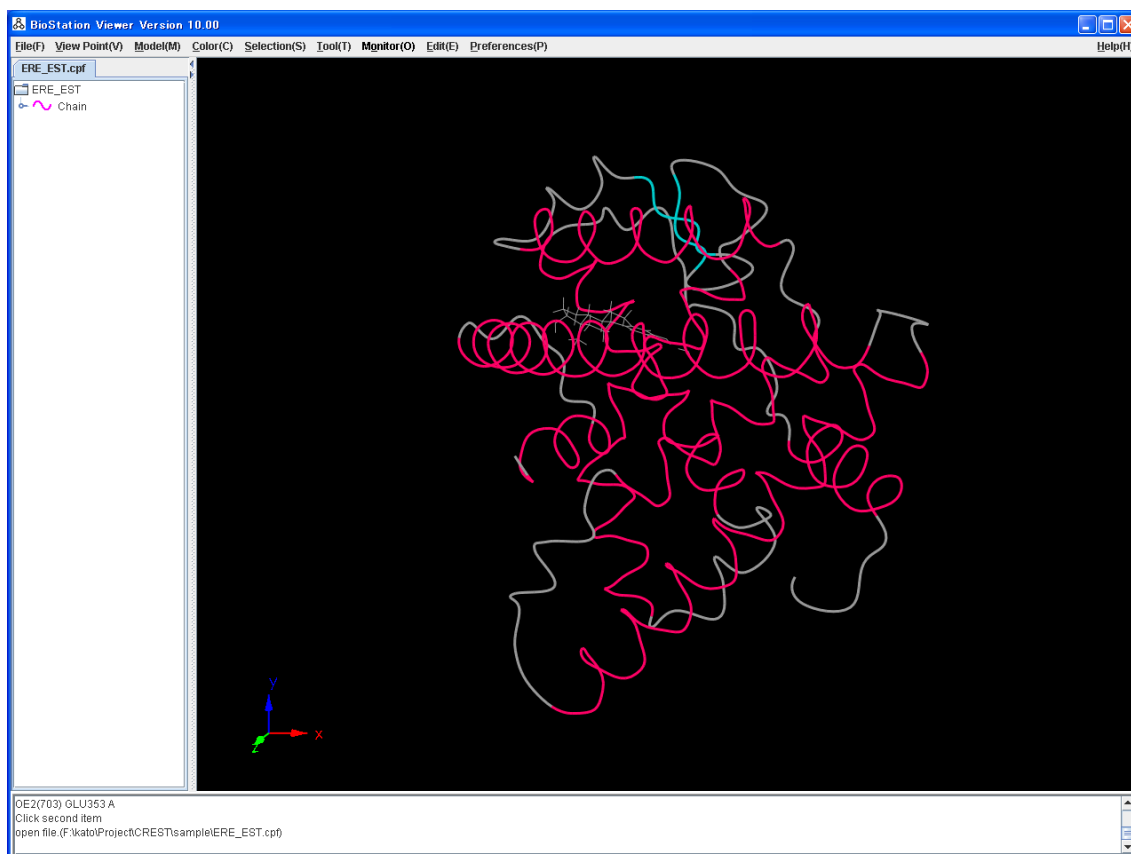


図 3.42 ファイルを入力して表示

### 3.3.2 フラグメント間相互作用エネルギー表示の指定

Tree 図よりリガンド EST600 をマウスの左ボタンでクリックして選択します。また、Monitor→Interfragment Interaction→1:1 を選択します。すると図 3.43 のような値の指定画面が表示されます。ここでは、min:-10,max:10 と入力して Ok ボタンをクリックします。これで、リガンドからの各残基間相互作用エネルギーを-10~10kcal/mol の範囲で色付けした分子構造が表示されます。相互作用エネルギー値がの値が負→零→正となるに従って、赤→白→青の順で色付けされ、色の濃さが相互作用の強さを表しています。表示を図 3.44 に示します。

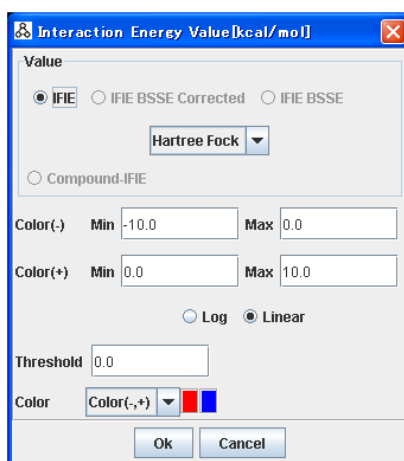


図 3.43 フラグメント間相互作用エネルギーの表示指定

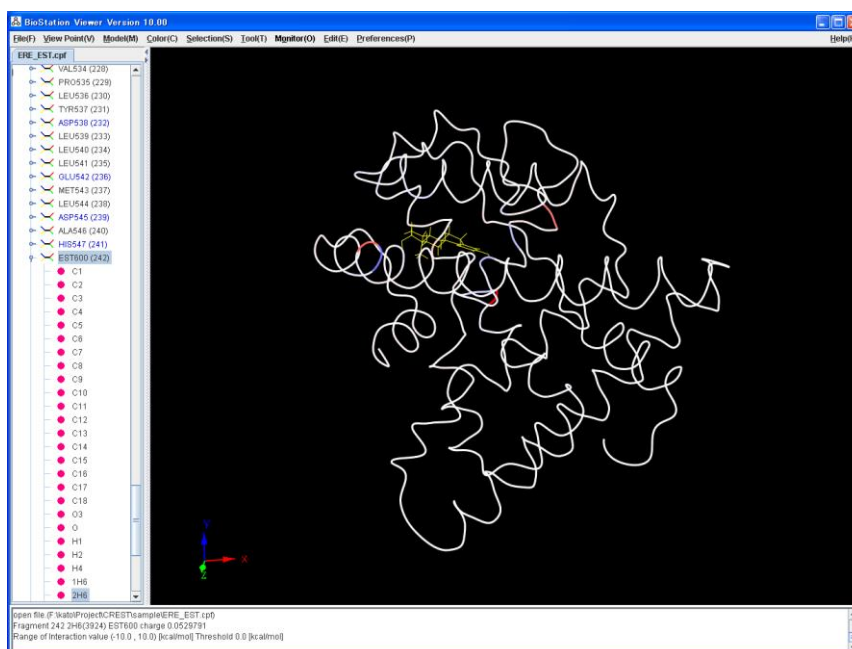


図 3.44 フラグメント間相互作用エネルギーの表示

### 3.3.3 閾値を指定して表示

ここで、フラグメント個別の表示を行うために、Model(Structure)→Off、Model(Atom)→Wire Frame にします。リガンドを目立たせるために、Tree 図のEST600 をマウスの右ボタンでクリックして表示属性指定画面を表示します。ここで、Colorはメニュー横のボタンをクリックして適当な色を選択し、Model は CPK を指定します(図 3.45)。次に、Monitor→Interfragment Interaction →1:1[lock]を選択し、値の指定画面で threshold に 2 を指定しますこれで、相互作用エネルギーの絶対値が 2kcal/mol 以下の残基が表示されなくなります。表示を図 3.46 に示します。

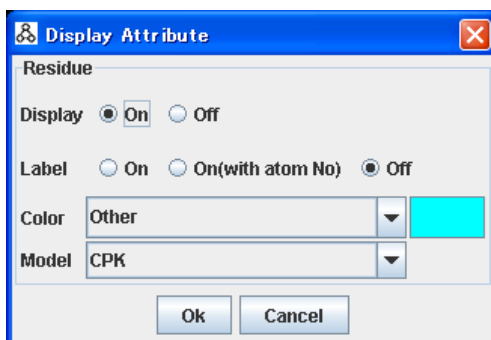


図 3.45 リガンドの表示指定

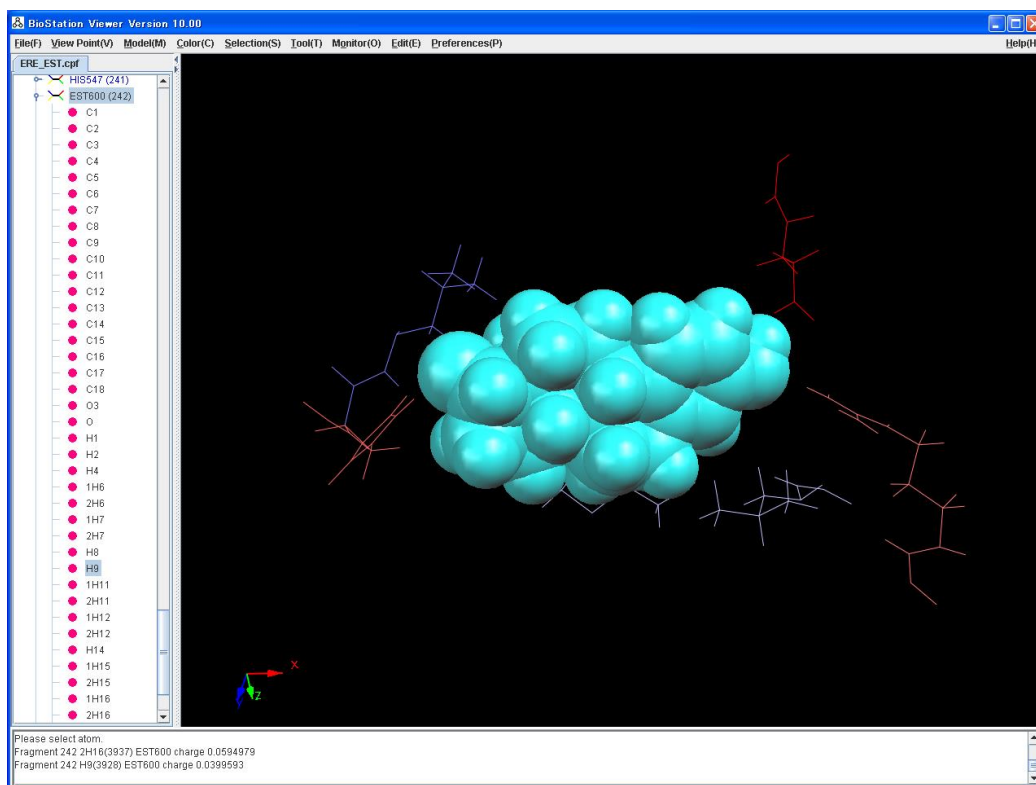


図 3.46 閾値を指定したフラグメント間相互作用エネルギーの表示



### 3.3.4 指定したフラグメント間の相互作用エネルギー表示

Model(Atom)→Stick にします。Monitor→Interaction Energy を選択します。もう一度このメニューが選択されるまではメニューが緑で表示され、表示をピックすると指定されたフラグメント(残基)間の相互作用エネルギーを表示します。リガンドとその周辺のフラグメントをクリックして表示した例を図 3.47 に示します。また、図 2.56 に示したようにフラグメント(残基)間の相互作用エネルギーの値をリスト表示することも可能です。

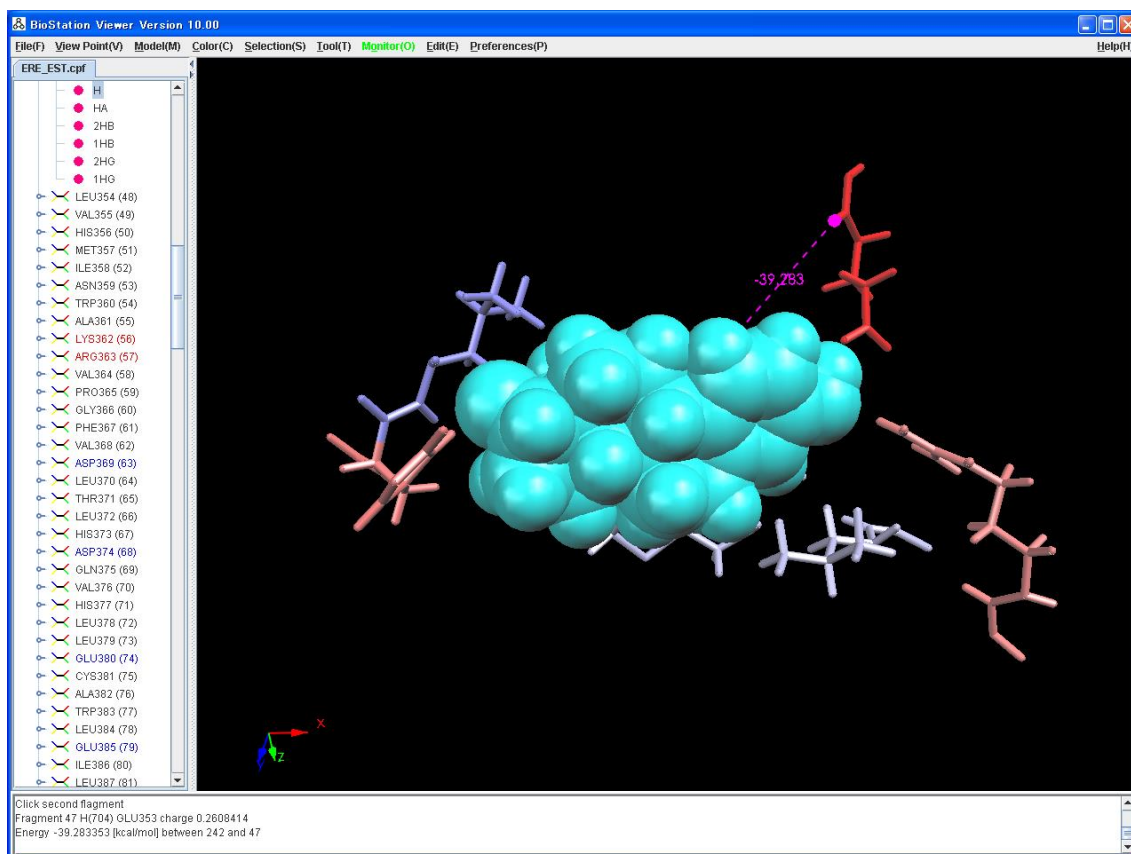


図 3.47 指定したフラグメント間の相互作用エネルギーの表示

### 3.4 重ね合わせ操作例

ERE\_EST.cpf、ERR\_RAL.cpf のデータを使用して重ね合わせの使用例を示します。

#### 3.4.1 ファイル入力

Viewer を起動して、ERE\_EST.cpf、ERR\_RAL.cpf を読み込み、Color(Structure)→File、Model(Structure)→C $\alpha$  を選択します。これでファイルごとに色付けされ表示されます。表示を図 3.48 に示します。

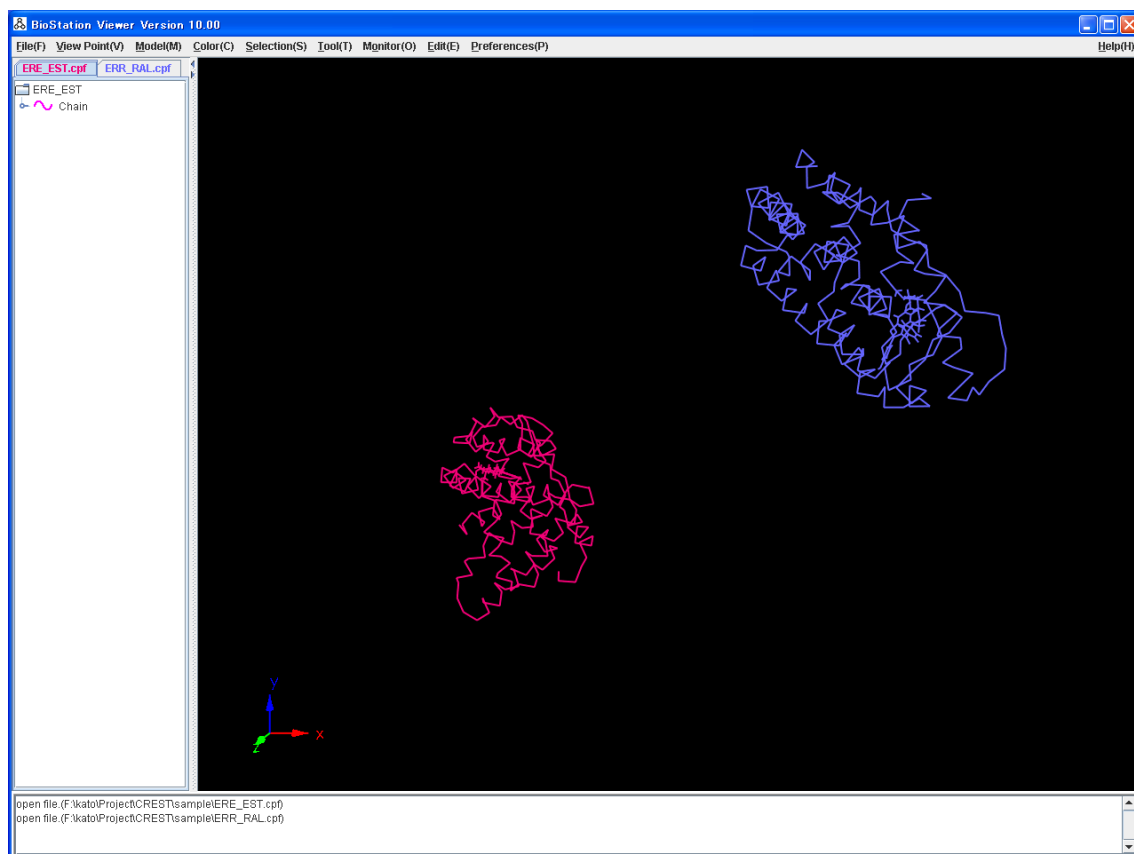


図 3.48 2つのファイルを読み込んで表示

### 3.4.2 すべてのC $\alpha$ を用いた指定による重ね合わせ

Tool→Overlay Molecules を選択します。重ね合わせの指定画面が表示されます。ここでは、デフォルトの値を使用するので Ok ボタンをクリックします。デフォルトでは、ファイルごとに C $\alpha$  の座標を用いて重ねあわせを行います。重ねあわせ後の表示を図 3.49 に示します。全体で重ね合わせのために全体的にずれがあります。

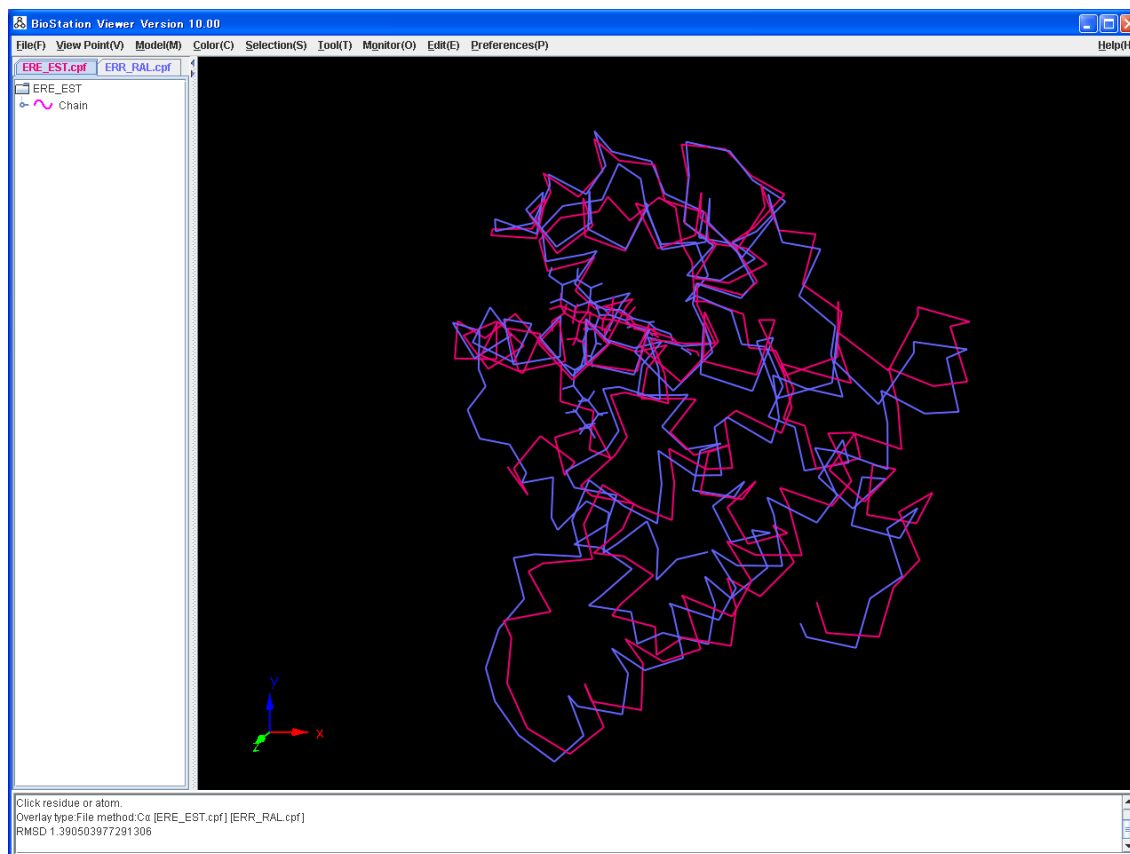


図 3.49 ファイルごとに C $\alpha$  の座標を用いて重ねあわせを行った表示

### 3.4.3 指定した残基内の原子(C $\alpha$ )指定による重ね合わせ

次に原子(C $\alpha$ )を3つ指定して重ねます。Tool→Overlay Molecules を選択し、Type の項目を Residue、Method の項目を C $\alpha$  を選択します。そして構造的に近い残基を交互にそれぞれ3点クリックします。クリックされた残基番号が入力フィールドに表示されます。入力フィールドはキーボードで編集可能なので間違えた場合はキーボードより削除が可能です。指定を図 3.50 に示します。ここで、”Ok”ボタンをクリックします。それぞれのリガンド(EST600,RAL600)をStick表示にします。アゴニスト(EST、ピンク色)、アンタゴニスト(RAL、青色)それぞれのリガンドが計都合した場合に、C末側のヘリックス 12 の位置が異なっている様子がわかります (図 3.51)。

次に Model(Structure)→C $\alpha$  {tube} を選択します。この表示を図 3.52 に示します。

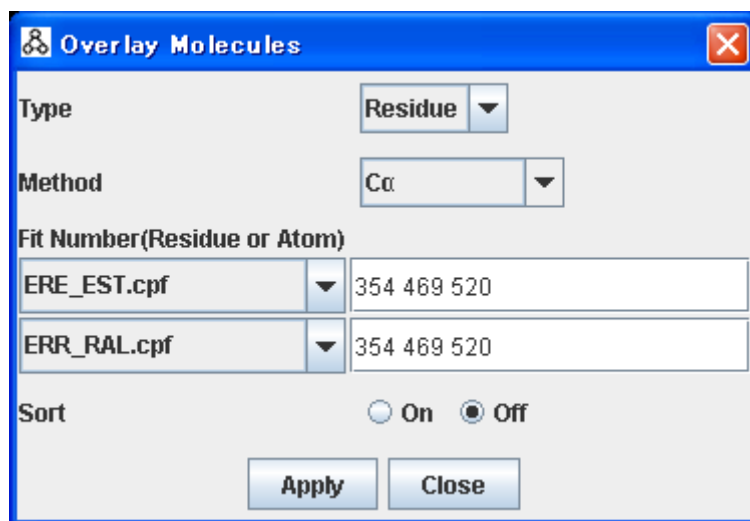


図 3.50 重ね合わせの指定

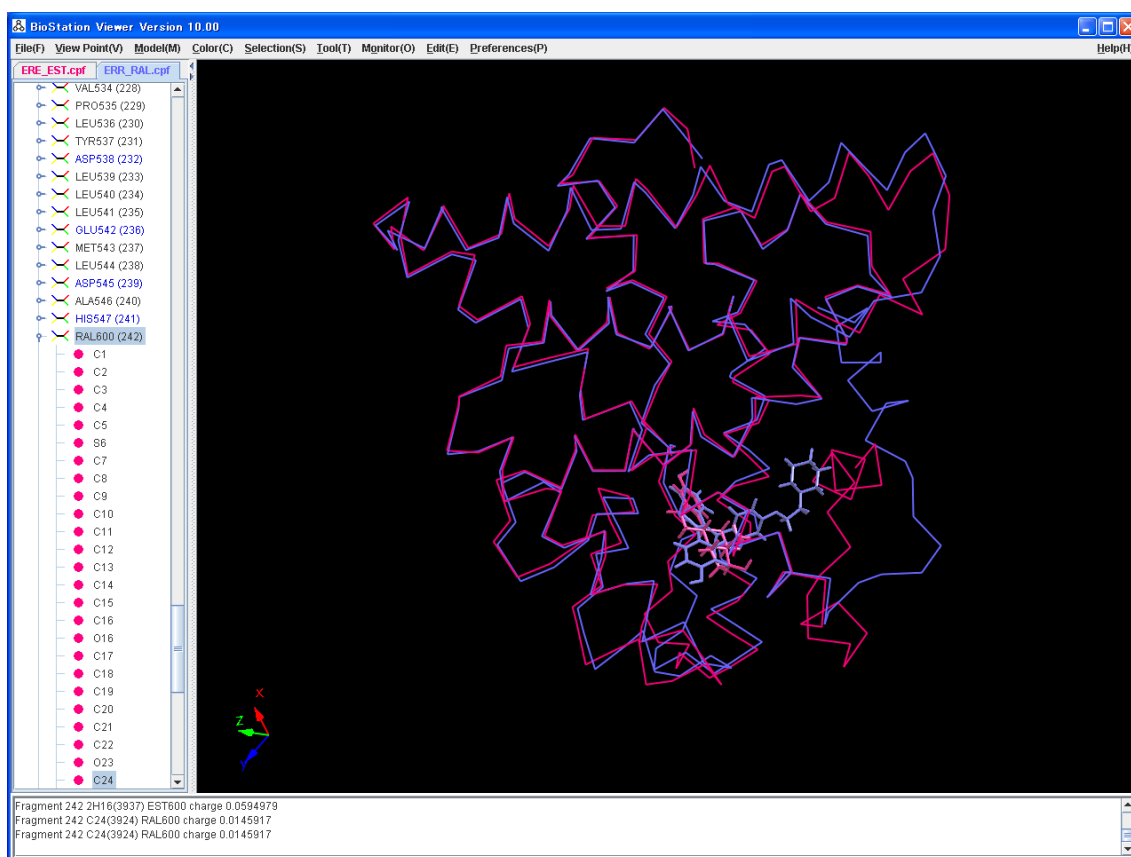


図 3.51 残基指定で重ね合わせを行った結果の表示

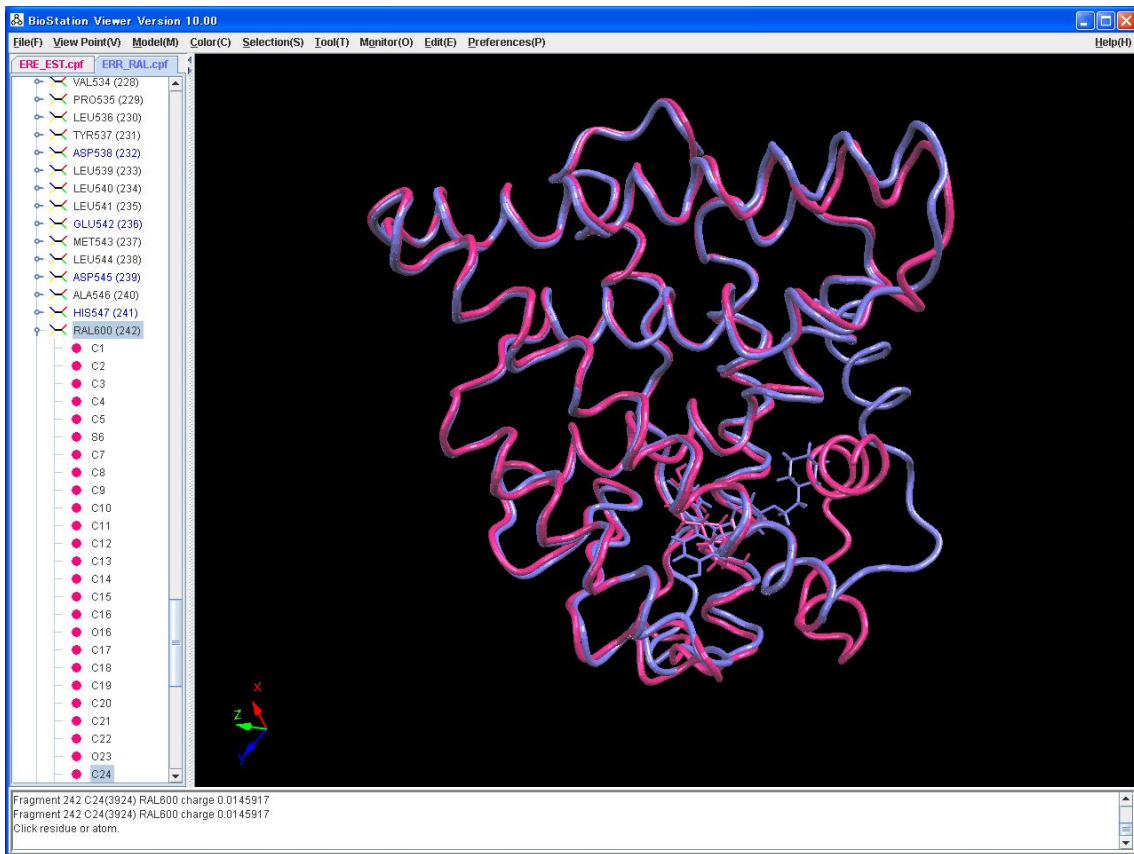


図 3.52 残基指定で重ね合わせを行った結果の表示(C $\alpha$  {tube})

### 3.5 水素付加の操作例

あらかじめ水素を取り除いたサンプルファイル(ERE\_EST\_noH.pdb)を用いて水素付加の操作例を示します。水素付加を行うにはReduceがインストールされている必要があります。インストールは7.5章をご参照ください。

ERE\_EST\_noH.pdbを読み込みます。表示されたらTool→Add Hydrogenを選択してください。すると、水素追加指定画面(図3.53)が表示されます。出力ファイル名は入力ファイル名に\_addHを付加したものがデフォルトとして表示されます。OptionsにはReduceで使用できるオプションを指定します。Okボタンをクリックするとコマンドプロンプトの画面が表示され実行のログが表示されます。終了したらexitを入力して(図3.54)閉じてください。

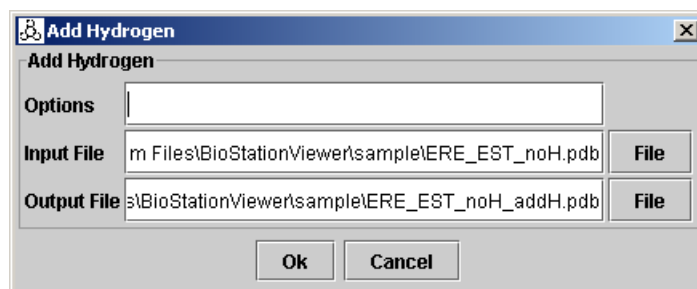


図 3.53 水素追加指定画面

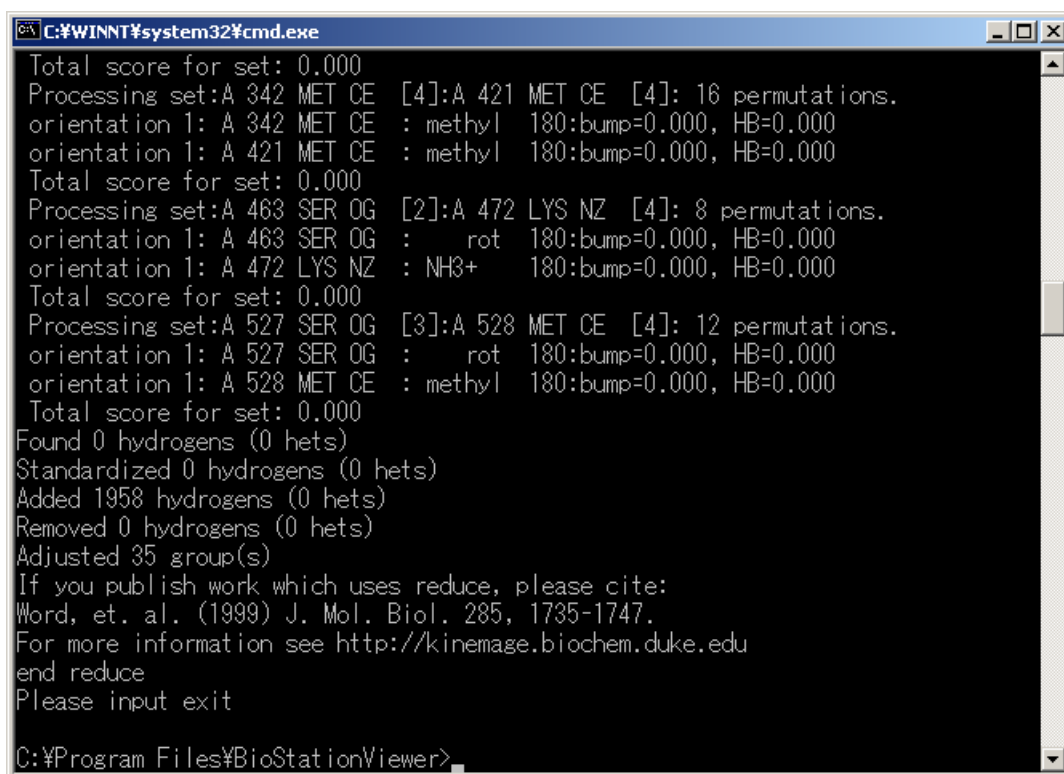


図 3.54 コマンドプロンプト

コマンドプロンプトを閉じると結果を表示するかどうかの問い合わせがあります。ここで Ok をクリックすると表示が水素付加されたものと置き換わります。

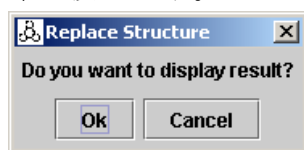


図 3.55 結果表示の確認

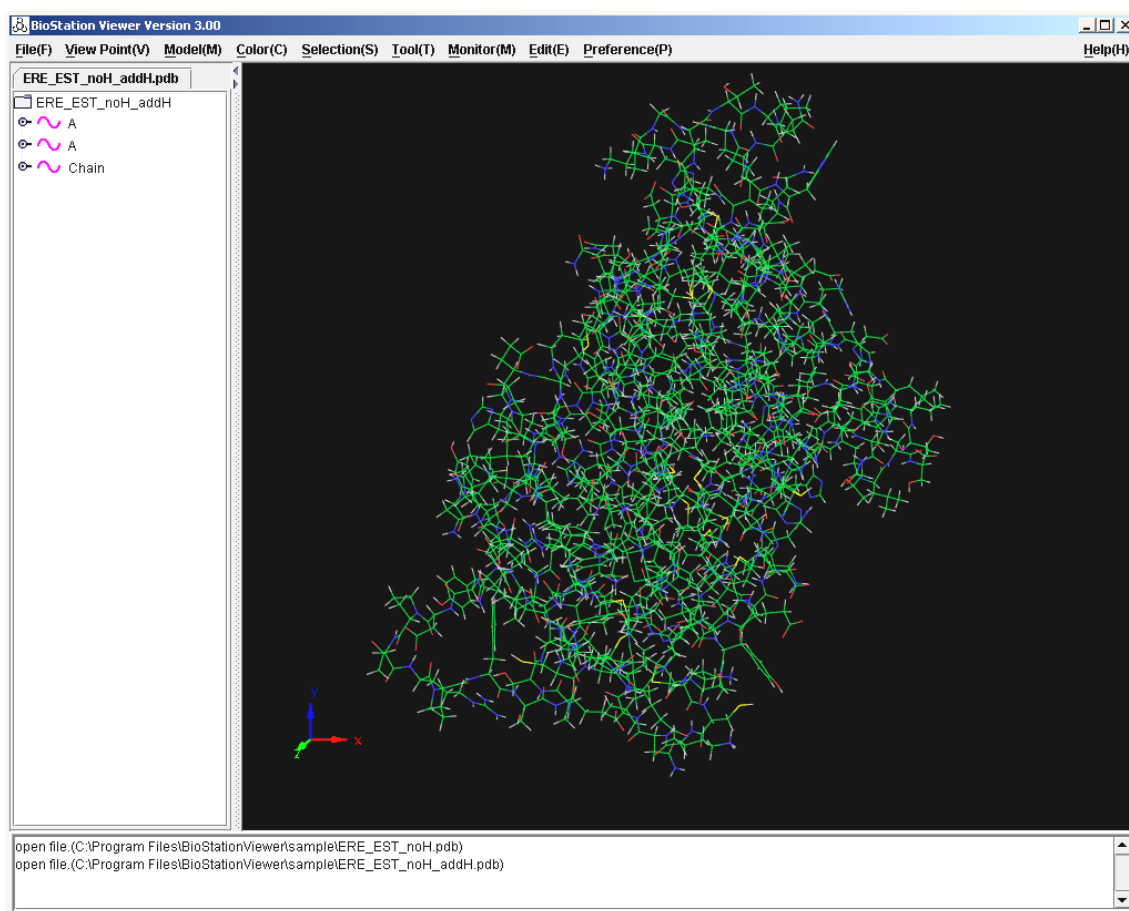


図 3.56 水素追加後の分子構造



### 3.6 フラグメント間相互作用エネルギー 多対1の例

DNA とタンパク質の計算を例にフラグメント間相互作用エネルギーの多対1の表示例を示します。サンプルファイル trunc-DB7\_Hopt\_moe\_DNA.cpf を読み込み、C $\alpha$  [tube]形式で表示します。。Monitor→Interfragment Interaction→N:1 を選択し指定画面を表示します。このファイルはフラグメント番号 23~222 までがタンパク質、223 がリガンド、1~22 までが DNA です。そこで、タンパク質、リガンドと DNA のフラグメント間相互作用を見るために Base Fragments に 23-222 と入力し、Min,Max を-100,100 にし”Ok”ボタンをクリックするとタンパク質、リガンドと DNA のフラグメント間相互作用エネルギーで色付けされ表示されます。赤の色の濃い部分が安定化している部分です。



図 3.57 フラグメント間相互作用エネルギー 多対1の例



### 3.7 トラジェクトリー表示例

#### 3.7.1 グリシンの例

サンプルファイル G05A.trj を読み込みます。はじめの分子構造が表示されます(図 3.58)。

▶ ボタンをクリックすると、構造が変化する様子が表示されます。最後のステップの分子構造を 図 3.59 に示します。

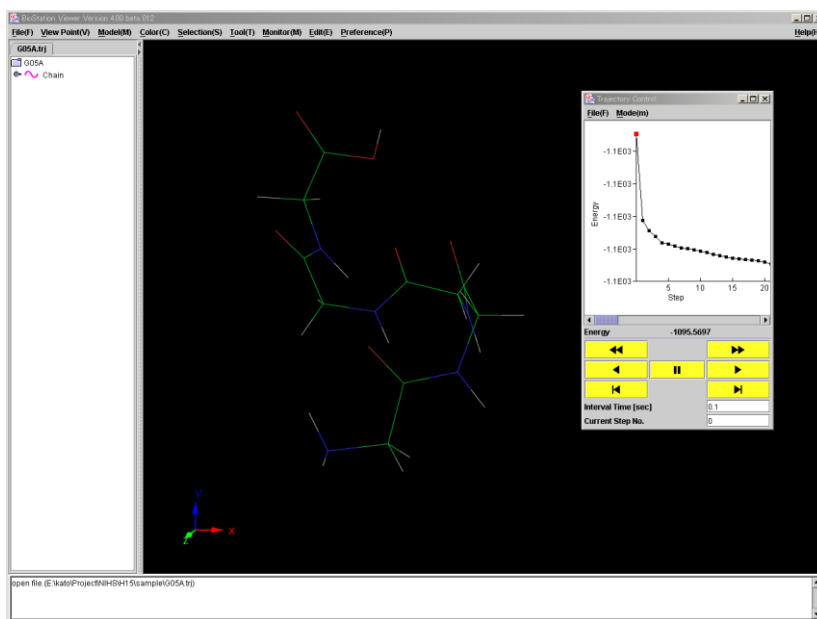


図 3.58 はじめの分子構造

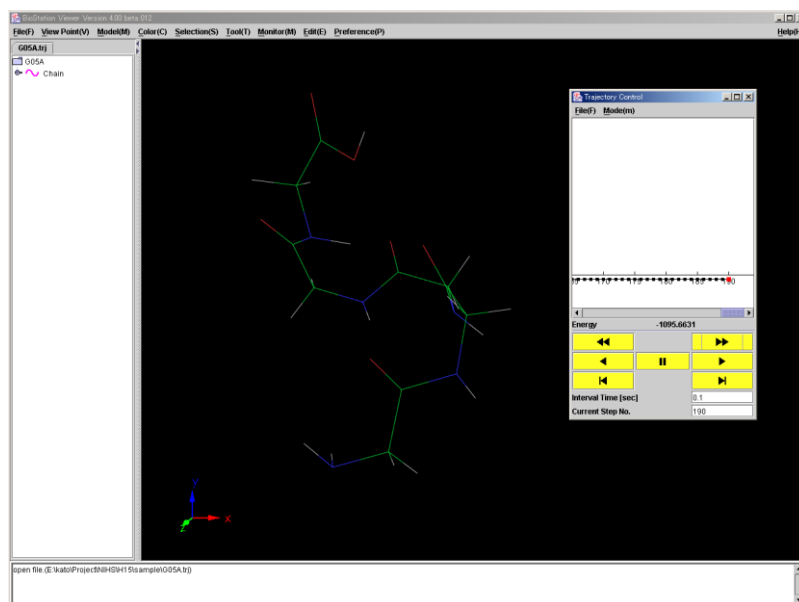


図 3.59 最後のステップの分子構造

### 3.7.2 SI8の例

サンプルファイル `dyna_pot_test.tr2` を読み込みます。このファイルは「戦略的基盤ソフトウェアの開発」の研究テーマのひとつ「ナノシミュレーション」の結果です。Si8 の MD 計算の結果を表示用に 10 ステップごとに編集したものです。ベクトルは、原子に作用している力の大きさをあらわしています。ファイル読み込み後 Model(Atom)→Wire Frame、Preference→Set Preferences→Arrow(Trajectory)タブ中→Scale に 10 を設定し、"Apply"ボタンをクリックして下さい。はじめのステップの表示を図 3.60 に示します。▶ ボタンをクリックすると、ベクトル表示が変化する様子が表示されます。最後のステップを図 3.61 に示します。

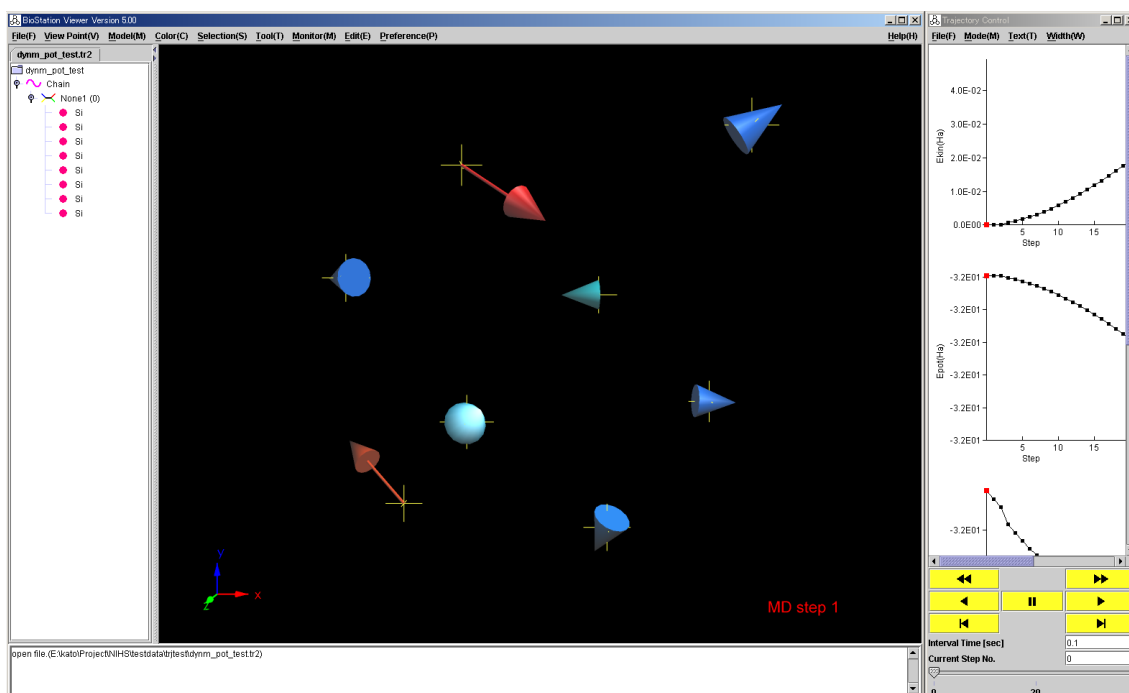


図 3.60 はじめのステップの表示

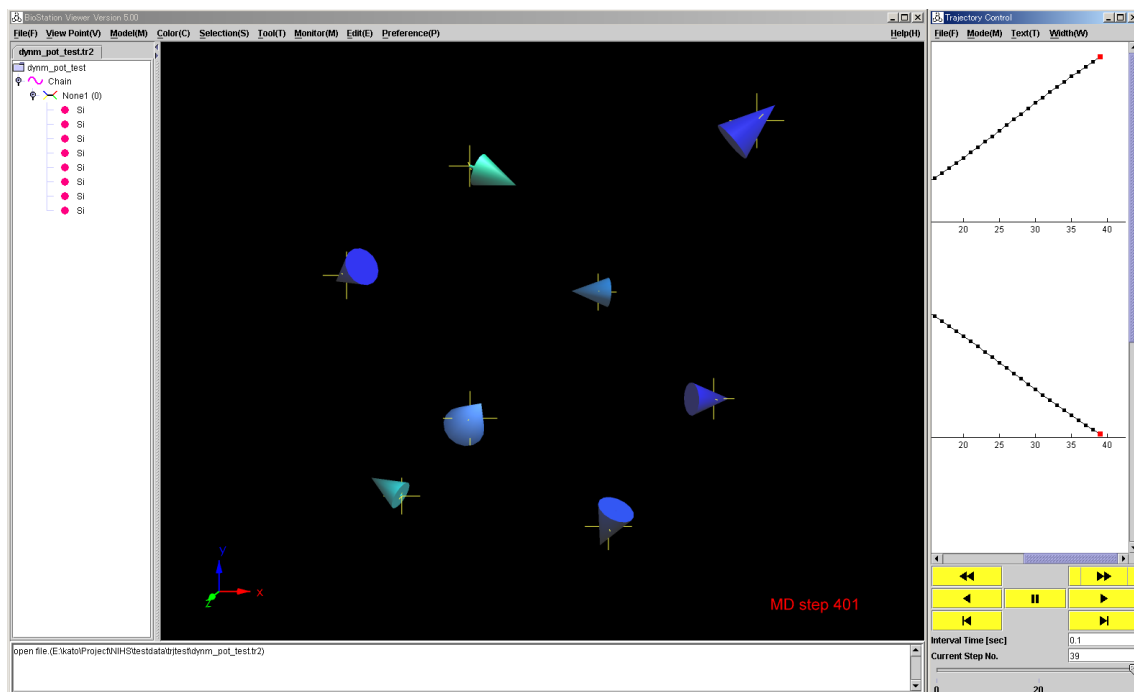


図 3.61 最後のステップの表示

### 3.7.3 トrajekトリー表示の動画ファイルを作成

BioStation Viewer 自体に動画ファイル作成機能がありますが、ここではオープンソースソフトウェアである FFmpeg を使用した動画ファイル作成例を説明します。

#### 1) ファイル読み込み

File > Open File からトラjekトリーファイルを読み込みます。この際、Files of Type で、Trajectory file を選択すると、トラjekトリーファイルだけがリストに表示されるのでファイルを選びやすくなります。トラjekトリーファイルを読み込むと、Trajectory Control ウィンドウが表示されます。

#### 2) 表示指定

フラグメント毎に色分けする場合は、BioStation Viewer のメインウィンドウから、Color > Fragment を選択します。

メインウィンドウの Preferences > Set Preference > Resolution で、Ball, Stick, CPK, Tube の解像度を最大(64)にしておくと、分子モデルがきれいに表示されます。また、画面左下の xyz 座標を表示しない場合は、Preference > Display Axis で Disable を選択します。

#### 3) 画像ファイル生成

Trajectory Control ウィンドウの、File > Create image files で、画像ファイルを保

存するフォルダを指定します。画像ファイルは、JPEG形式で保存されます。ファイル名は6桁の連番をつけたファイル名になります。

#### 4) 動画ファイル作成の準備

FFmpeg のソースコードは、<http://ffmpeg.org/> からダウンロードできます。Windows用の実行形式は、<http://blog.k-tai-douga.com/> 等からダウンロードできます (Windows Vista でも使用可能)。ダウンロードした zip ファイルを解凍してできた `ffmpeg.exe` を、`C:\¥Program Files¥ffmpeg` 等へコピーし、スタート > コントロール パネル > システム > システムの詳細設定 > 環境変数 のユーザー環境変数の PATH の最後に

```
;C:\¥Program Files¥ffmpeg
```

を追加しておく、実行時に `ffmpeg.exe` を保存したフォルダを指定しなくても済むので便利です (;の前後にスペースを入れないように注意する)。

#### 5) 動画ファイル作成

入力画像ファイルが保存されているフォルダで、コマンド プロンプトを開き、下記のように入力します。Windows Vista の場合、エクスプローラの右側のウィンドウに開きたいフォルダ名を表示しておき、マウスのカーソルをフォルダ名に合わせて、Shift キーを押しながらマウスの右ボタンをクリックし、コマンド ウィンドウをここで開く を左クリックすると簡単です。

```
ffmpeg -r 75 -i "image%06d.jpg" -vcodec wmv2 -sameq -s 640x480  
out_r75_640x480.wmv
```

**-r 75** :フレームレート(1秒間に表示するコマ数)を75に設定(デフォルトは25)。75にすると三倍速で表示される。

**-i "image%06d.jpg"**:入力する画像ファイルの指定。%06d は、ファイル名中の連番が000000~999999であることを示す。

**-vcodec wmv2**:画像コーデックに Windows Media Video を指定する(mjpeg や msmpeg4v2 (MS-MPEG4)を指定すると、PCによっては PowerPoint で動画が再生できないので使用しない)。

**-s 640x480**:画面サイズを640x480で保存する(-s オプションを省略すると、入力画像ファイルと同じサイズで動画ファイルを作成する。入力画像が大きい場合は、動画ファイルが重くなるので、-s オプションで画像サイズを指定した方がよい)。

**-sameq**:入力画像と同じ画質を指定

**out\_r75\_640x480.wmv**:出力する動画ファイル名。拡張子は wmv とする。

また、

```
ffmpeg -h > ffmpeg.txt
```

で FFmpeg のヘルプを

```
ffmpeg -formats > formats.txt
```

で **FFmpeg** で利用できるフォーマットやコーデックをファイルに保存することができます。

6) 作成した動画ファイルを **PowerPoint** に貼り付ける

メニューの挿入 > ビデオ > ファイルからビデオを選択します。

**PowerPoint** に貼り付けた動画やサウンドは、埋め込まれるのではなく、リンクされるだけなので、別の PC 等へコピーする場合は、**PowerPoint** のファイル (**ppt** ファイル) だけでなく、動画ファイル (**wmv** ファイル) も一緒にコピーします。

#### 参考文献

- 1) [http://opensourceaki.blogspot.com/2007/10/ffmpeg\\_19.html](http://opensourceaki.blogspot.com/2007/10/ffmpeg_19.html)
- 2) 原一浩、寺田学、本間雅洋、足立健誌、堀内康弘、堀田直孝、月村潤、尾花衣美、**FFmpeg** で作る動画共有サイト(毎日コミュニケーションズ、2008)

### 3.8 結晶系の表示例

Bi 超薄膜(4層)の原子構造と電荷密度の Gaussian Cube ファイルを読み込み等値面、周期表示を行います。このファイルは「戦略的基盤ソフトウェアの開発」の研究テーマのひとつ「ナノシミュレーション」の結果です。

#### 3.8.1 ファイルの読み込み、等値面の表示

サンプルファイル 4LBi.cube を読み込みます。このデータは電子密度のデータなので、ファイルタイプは Density を選択します。次に、表示形式を Ball&Stick 等値面の値を 0.009 に、透明度を 50,境界表示を On にすると等値面が表示されます。

指定画面、表示画面を図 3.62～図 3.64 に示します。

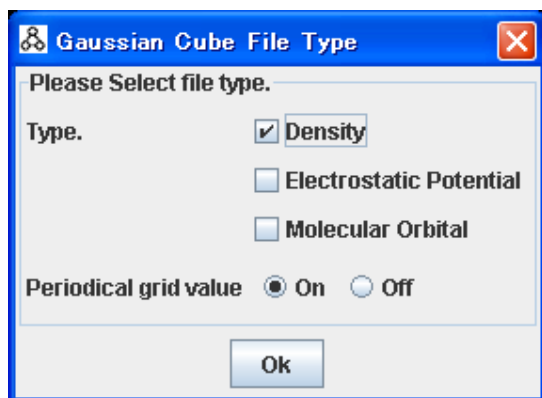


図 3.62 ファイルタイプの選択

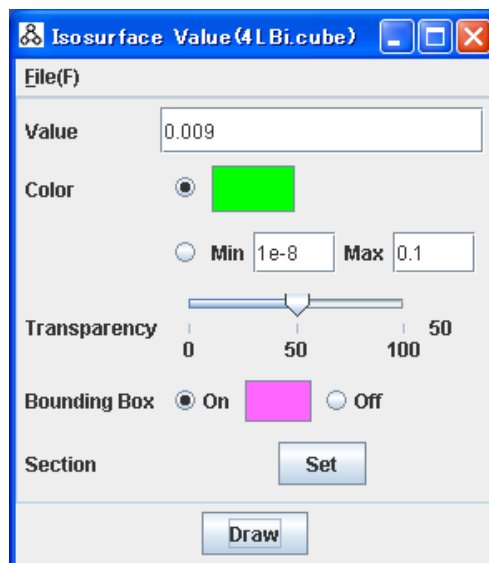


図 3.63 等値面の指定

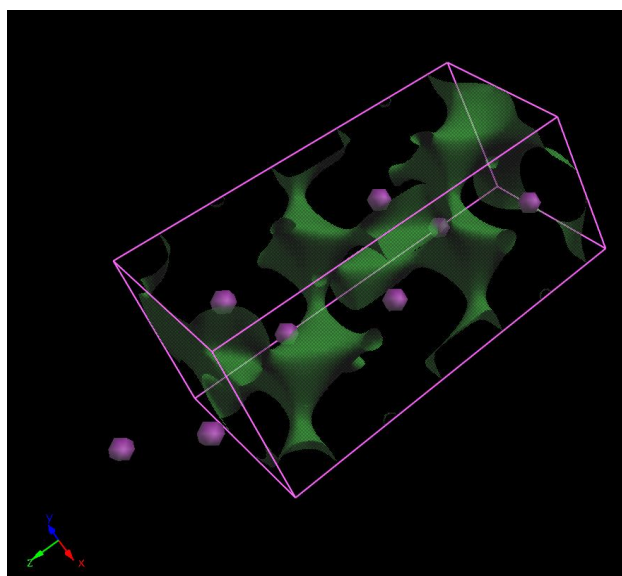


図 3.64 電子密度の等値面の表示

### 3.8.2 周期表示

View PointメニューのPeriodicを選択し周期表示指定画面を表示します。この例ではGaussian Cubeファイルを読み込んでいるのでX, Y, ZのIntervalが3つずつ入力が可能です。デフォルトではファイルに記述された値が指定されています。X, YのNumを2に指定して”Draw”ボタンをクリックしてください。すると、X,Yそれぞれの方向に2つずつ表示されます。等値面の表示指定で枠の色も変更します。

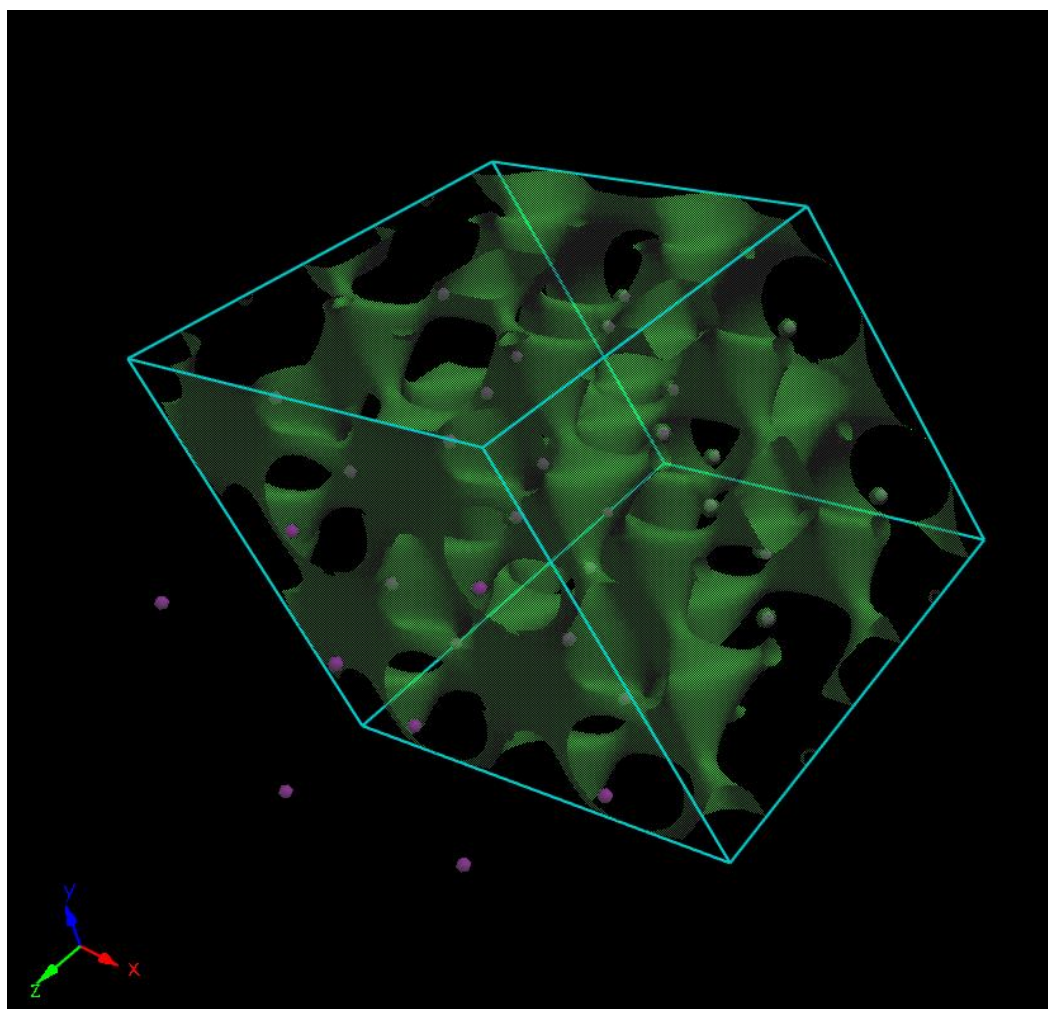


図 3.65 周期表示例

### 3.8.3 断面の表示

等値面指定画面のSectionの”Set”ボタンをクリックします。すると断面指定画面が表示され、3D表示上では断面が半透明で表示されます。ここで、Z方向を少しずらし、原子を横切るようにして、Color RangeのMinを1.0E-3にして”Draw”ボタンをクリックします。これで断面が表示されます。

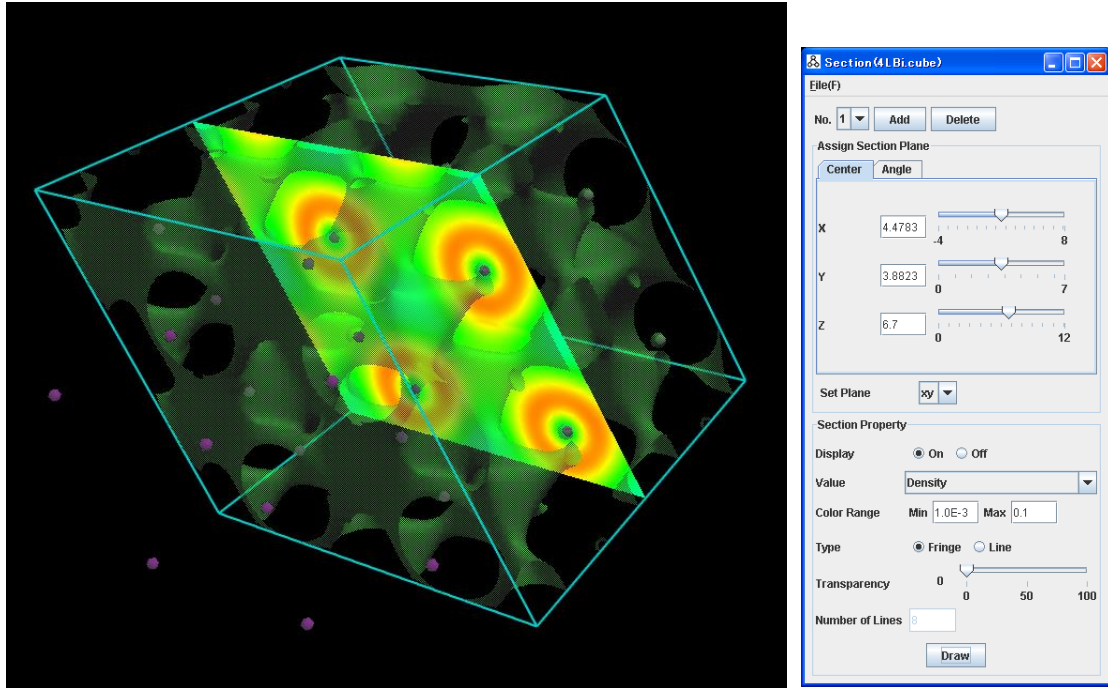


図 3.66 断面指定画面と断面表示例

次に、Type を Line に、Number of lines を 32 にして”Draw”ボタンをクリックします。等高線が表示されます。

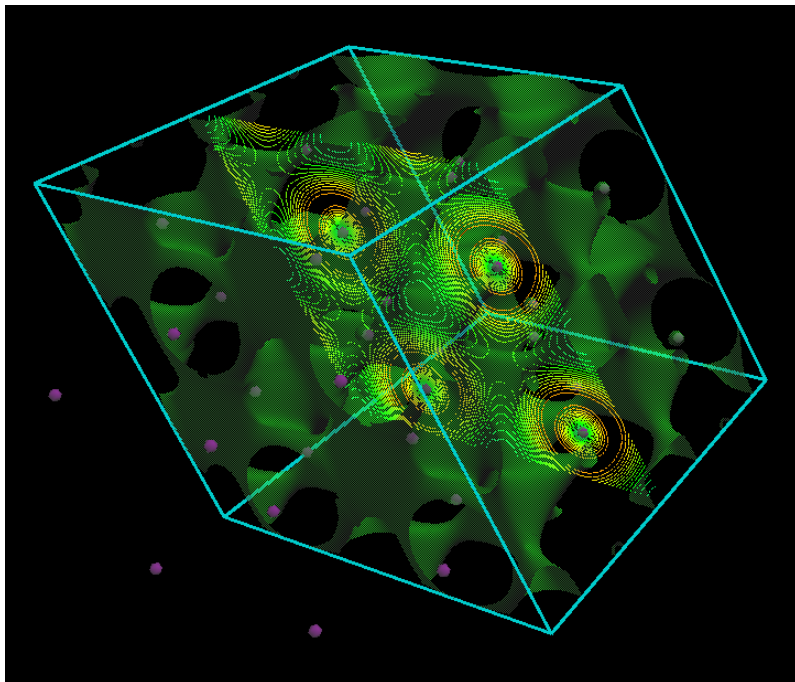


図 3.67 等高線表示例



断面指定の Type を Fringe に戻し、等値面指定の Color を Min,Max の指定にして Min の値を  $1e-3$  にします。これで、等値面と断面の色のつけ方が同じになるので、断面と交差する等値面の色が同じになります。

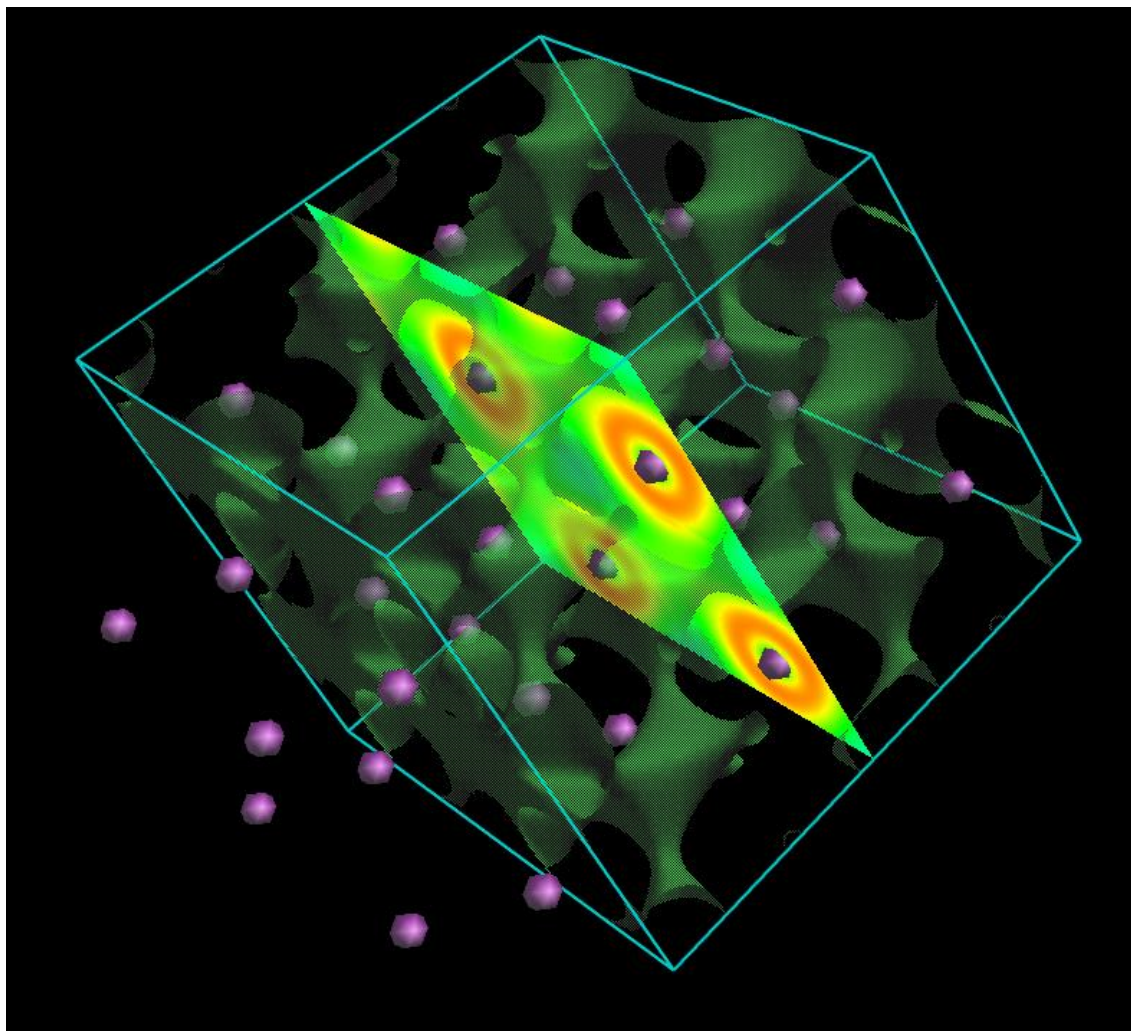


図 3.68 等値面の色のつけ方を変更して表示

### 3.8.4 ボンドの表示

Preference メニューの Set Preference を選択し Preference 画面で Connect Atom の Scale を 1.1、Covalent を選択して、Resolution の Ball を 16 にして”Apply”ボタンをクリックすると、ボンドが表示され原子の表示が滑らかになります。

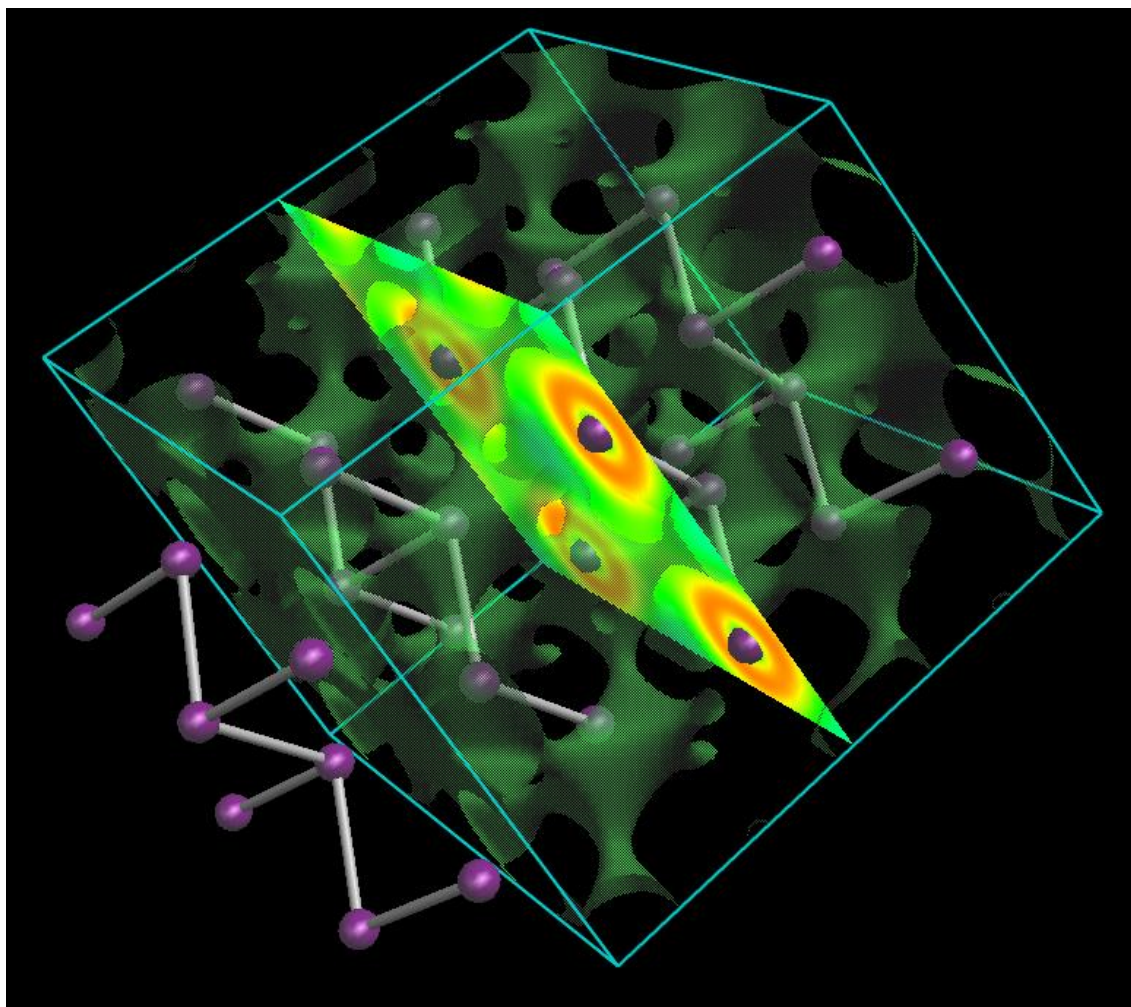


図 3.69 球の解像度、ボンドのスケールを変更して表示

### 3.9 CHPI プログラム使用例

CHPI<sup>27)</sup>は、微生物化学研究所 梅沢先生、CHPI 研究所 西尾先生、微生物化学研究会によって開発されたプログラムです。この機能を使用して、論文を執筆される場合は、参考文献27の参照を記述するようにしてください。BioStationViewer では、このプログラムの入力ファイルを作成し、起動、結果表示を行うことができます。CH/ $\pi$ 相互作用の詳細は、「新版 有機化学のための分子間力入門」講談社を参照ください。

簡便な使用方法を示します。まず、解析対象とする PDB ファイルを入力します。次に、Tool→CHPI を選択すると CHPI 処理画面が表示されます。デフォルトのパラメータで実行する場合は、ここで、”Execute CHPI Program”ボタンをクリックすることで、実行し、結果が表示されます。

#### 3.9.1 CH/ $\pi$ 相互作用の探索方法

XH/ $\pi$ の探索方法を以下に示します。

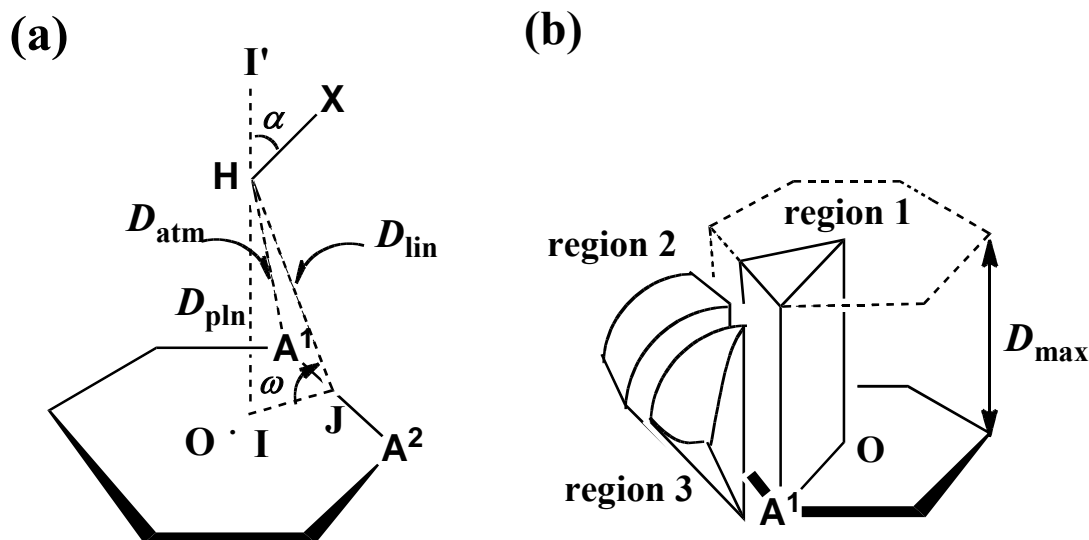


図 3.70 XH/ $\pi$ 探索方法説明図

Method for exploring XH/ $\pi$  contacts (the six-membered aromatic ring is shown as an illustrative example). (a) O: centre of the  $\pi$ -plane. A<sup>1</sup> and A<sup>2</sup>: nearest and second nearest  $sp^2$ -atoms, respectively, to the hydrogen H.  $\omega$ : dihedral angle defined by A<sup>1</sup>OA<sup>2</sup> and HA<sup>1</sup>A<sup>2</sup> planes.  $\alpha$ : X-H-I' angle.  $D_{pln}$ : perpendicular distance between H and the  $\pi$ -plane (H/I).  $D_{atm}$ : HA<sup>1</sup> distance.  $D_{lin}$ : distance between H and the line A<sup>1</sup>-A<sup>2</sup> (H/J). (b) Regions to be searched. Region 1: zone where H is above the ring. Regions 2 and 3: zones where H is out of region 1 but may interact with the  $\pi$ -ring. Unless otherwise noted, the program was run to search for short H/ $\pi$  contacts with the following conditions:  $D_{max} = 3.05 \text{ \AA}$ ;  $D_{pln} < D_{max}$  (region 1);  $D_{lin} < D_{max}$  (region 2);  $D_{atm} < D_{max}$  (region 3);  $\omega_{max} = 127.5^\circ$ ,  $-\omega_{max} < \omega < \omega_{max}$ ;  $\alpha < 63^\circ$ .  $D_{hpi}$ : H/ $\pi$  distance ( $D_{pln}$  for region 1,  $D_{lin}$  for region 2,  $D_{atm}$  for region 3).

### 3.9.2 入力パラメータ編集

入力パラメータ編集画面を図 3.71 に示します。ここで、各パラメータを指定します。**Pi-system Table** で指定されたファイルは、次の PI 情報ファイル編集で編集します。

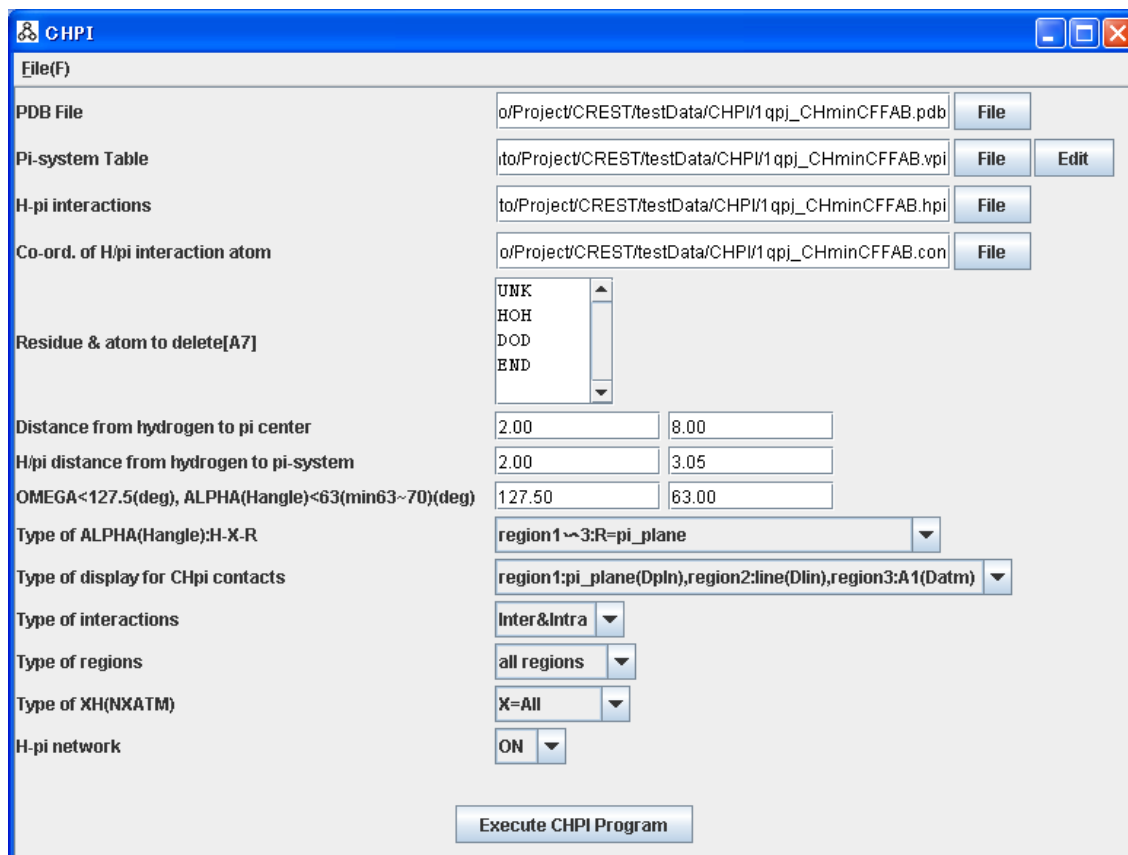


図 3.71 入力パラメータ編集画面

File メニューの動作を説明します。

#### 1) Open

パラメータファイルを指定し入力します。ファイルの内容が GUI へ設定されます。**Pi-system Table** で指定されたファイルは入力され、PI 情報に設定されます。

#### 2) Save

指定されている内容をファイルに格納します。

#### 3) Set Default Value

デフォルト値を設定します。PDB ファイルは、3D 表示で表示されているファイルが設定されます。**Pi-system Table** は、“PDB ファイル名.vpi”ファイルが設定され、このファイルが存在すればファイルを読み込み、なければ、デフォルトの PI 情報が設定され\*.vpi ファイルが作成されます。

#### 4) Close

画面を閉じます。

入力項目を説明します。

1) **PDB File**

解析対象の PDB ファイルを指定します。

2) **Pi-system Table**

PI 情報ファイルを指定します。Edit ボタンをクリックすると編集画面が開きます。

3) **H/pi interactions**

CHPI 結果ファイルの出力先ファイルを指定します。

4) **Co-ord. of H/pi interaction atom**

CHPI 相互作用の結果の座標のみを記述したファイルの出力先ファイルを指定します。

5) **Residue & atom to delete[A7]**

解析対象からはずす残基(A3)、原子名(+A4)を指定します。最後に”END”と記述します。

6) **Distance from hydrogen to pi center**

H と環の中心(O)からの距離(Dcent)の範囲を指定します。通常は変更しないでください。

7) **H/pi distance from hydrogen to pi-system**

region1 の  $D_{max}$  の範囲を指定します。

8) **OMEGA<127.5(deg), ALPHA(Hangle)<63(min63~90)(deg)**

$\omega$ 、 $\alpha$  の値を指定します。通常は変更しないでください。

9) **Type of ALPHA(Hangle):H-X-R**

CHPI 計算の水素の角度(H-X-R) [R=pi\_plane, line(A<sup>1</sup>-A<sup>2</sup>), A<sup>1</sup>(closest pi\_atom)]の取り方を指定します。通常は a) です。

a) region1~3: R=pi\_plane 全ての領域で、H-X-pi\_plane(= $\alpha$ )をパラメータとして使います。

b) region1: R=pi\_plane, region2: R=line, region3: R=A<sup>1</sup> region1 で H-X-pi\_plane, region2 で H-X-line, region3 では H-X-A<sup>1</sup>をパラメータとして使用します。

c) region1~3:R=A<sup>1</sup> H-X-A<sup>1</sup>を全ての領域で使います。

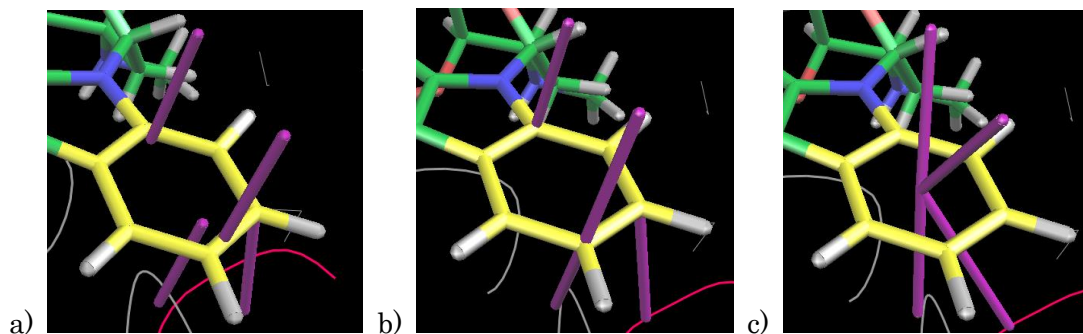
10) **Type of display for CHpi contacts**

相互作用の PI 側の表示位置を指定します。

a) region1: pi\_plane (Dpln), region2: line (Dlin), region3: A<sup>1</sup> (Datm)

b) region1~3: A<sup>1</sup> (Datm)

c) region1~3: O (Dcent)



**11) Type of interactions**

計算する相互作用の分子間の組み合わせを指定します。inter/intra の区別は、PDB ファイルのチェーン ID で区別しているため、必要に応じて PDB ファイルを編集してから、実行してください。

**12) Type of regions**

計算する相互作用の範囲を指定します。

**13) Type of XH(NXATM)**

対象とする原子を指定します。

**14) H-pi network**

結果ファイルへの CHPI ネットワーク出力の有無を指定します。

**15) Execute CHPI Program**

このボタンをクリックすると実行が開始されコマンドプロンプトにログが表示されます。



### 3.9.3 PI 情報ファイル編集

Pi-system Table の **Edit** ボタンをクリックすると編集画面が開き、PI 情報を編集します。編集画面を図 3.72 に示します。

PI-system	K	L	M	VPI	N	1	2	3	4	5	6	
PRTN	HIS	1	1	1	FIV	5	CG	ND1	CE1	NE2	CD2	
PRTN	PHE	1	1	1	SIX	6	CG	CD1	CE1	CZ	CE2	CD2
PRTN	TYR	1	1	1	SIX	6	CG	CD1	CE1	CZ	CE2	CD2
PRTN	TRP	1	1	2	FIV	5	CG	CD1	NE1	CE2	CD2	
PRTN	TRP	1	2		SIX	6	CE2	CD2	CE3	CZ3	CH2	CZ2
1WQZ	DA	1	1	2	FIV	5	N9	C8	N7	C5	C4	
1WQZ	DA	1	2		SIX	6	C5	C4	N3	C2	N1	C6
1WQZ	DC	1	1	1	SIX	6	N1	C2	N3	C4	C5	C6
1WQZ	DG	1	1	2	FIV	5	N9	C8	N7	C5	C4	
1WQZ	DG	1	2		SIX	6	C5	C4	N3	C2	N1	C6
1WQZ	DT	1	1	1	SIX	6	N1	C2	N3	C4	C5	C6
RNA	DU	1	1	1	SIX	6	N1	C2	N3	C4	C5	C6
1L2K	HEM	1	1	12	OLE	3	C1A	CHA	C4D			
1L2K	HEM	1	2		FIV	5	NA	C1A	C2A	C3A	C4A	
1L2K	HEM	1	3		OLE	3	C4A	CHB	C1B			
1L2K	HEM	1	4		OLE	3	C1B	CHB	C4A			
1L2K	HEM	1	5		FIV	5	NB	C1B	C2B	C3B	C4B	
1L2K	HEM	1	6		OLE	3	C4B	CHC	C1C			
1L2K	HEM	1	7		OLE	3	C1C	CHC	C4B			
1L2K	HEM	1	8		FIV	5	NC	C1C	C2C	C3C	C4C	
1L2K	HEM	1	9		OLE	3	C4C	CHD	C1D			
1L2K	HEM	1	10		OLE	3	C1D	CHD	C4C			
1L2K	HEM	1	11		FIV	5	ND	C1D	C2D	C3D	C4D	
1L2K	HEM	1	12		OLE	3	C4D	CHA	C1A			
1L2K	HEM	2	1	1	OLE	3	CBB	CAB	C3B			
1L2K	HEM	3	1	1	OLE	3	CBC	CAC	C3C			
2INQ	MT1	1	1	1	SIX	6	C11	C12	C13	C14	C15	C16

図 3.72 PI 情報ファイル編集画面

フォーマットを説明します。1 行に以下の項目が記述されています。

- 識別名 任意の識別名をつけます。
- 残基名 PDB 中の対象とする残基名を指定します。
- K 指定した残基内での構成要素番号を指定します。
- L 1 つの構成要素内での通し番号を指定します。
- M 構成要素内の環要素数をはじめに指定します。
- VPI FIV/SIX/OLE を指定します。
- N 環要素の構成原子数を指定します。
- 1-6 環要素の構成原子名を指定します。

PI 情報の編集例を示します。ここでは、STU 周辺に直目するため表示を STU 周辺にします。STU の適当な原子(C18)をクリックして、メニューの **Tool→Display Residue in Distance** で 10 Åを指定して、STU 周辺の表示にし、**Tool→Set Rotation Center** を選択して、回転中心をクリックした原子に設定します(図 3.73)。Tree 図で、STU をクリックし右ボタンを押すと表示形式指定の画面が表示されるので **Color** を Atom に、**Model** を Stick にします(図 3.74)。

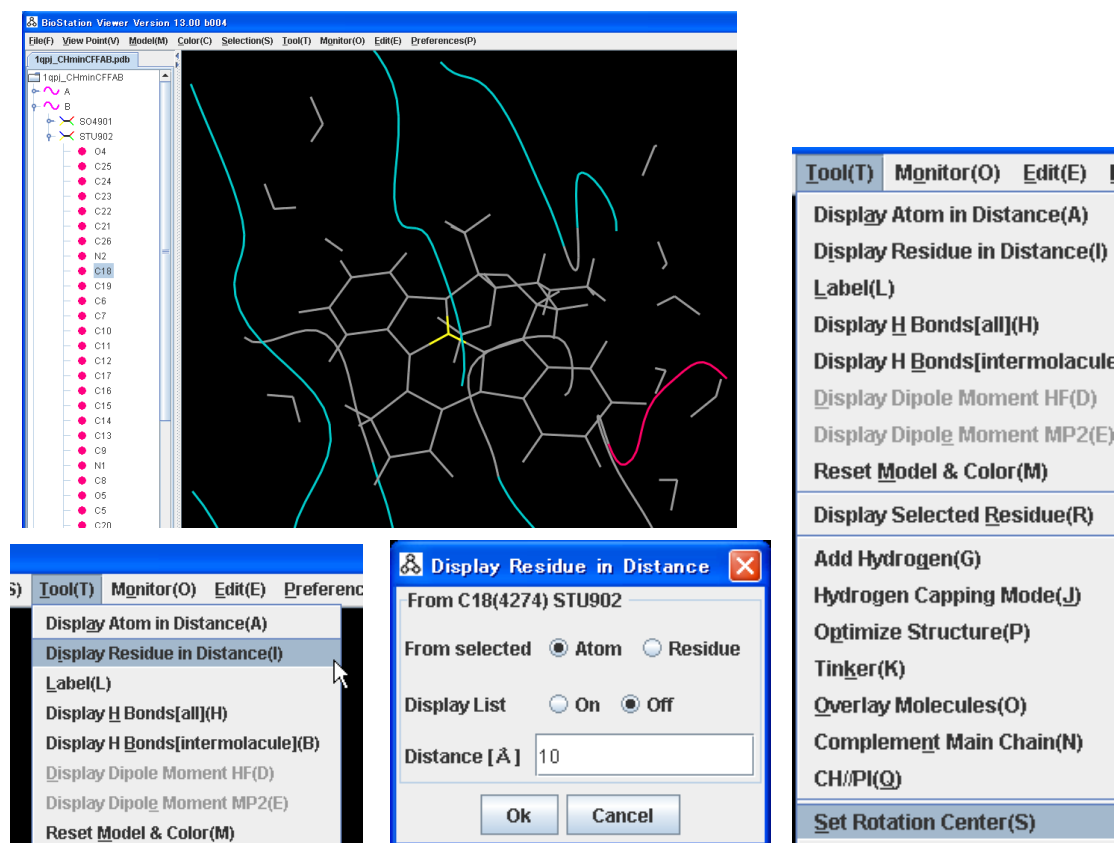


図 3.73 Display Residue in Distance、Set Rotation Center を選択

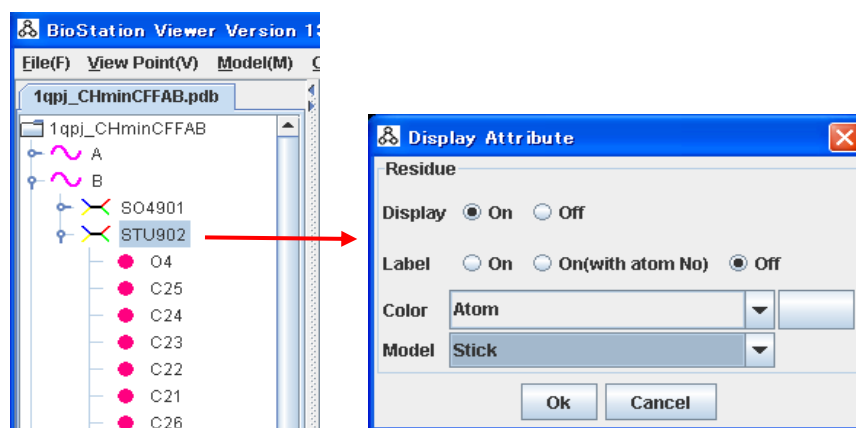


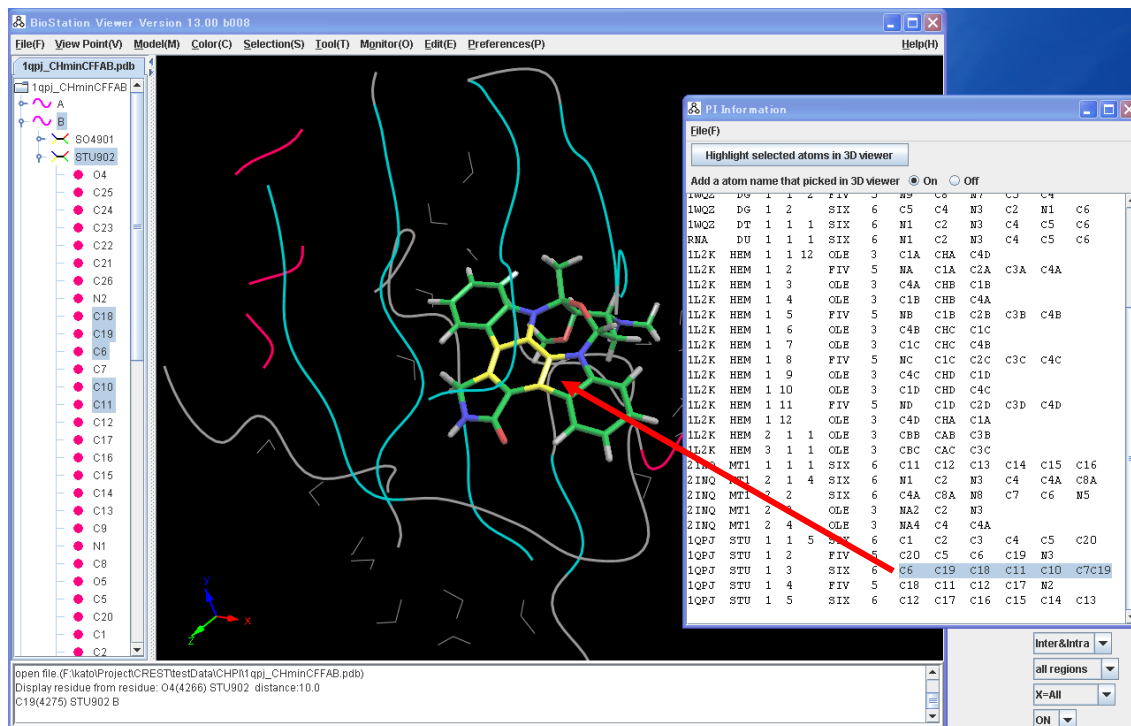
図 3.74 マウスの右ボタンを STU 上でクリックして STU の表示属性を設定



各ボタンの動作を説明します。

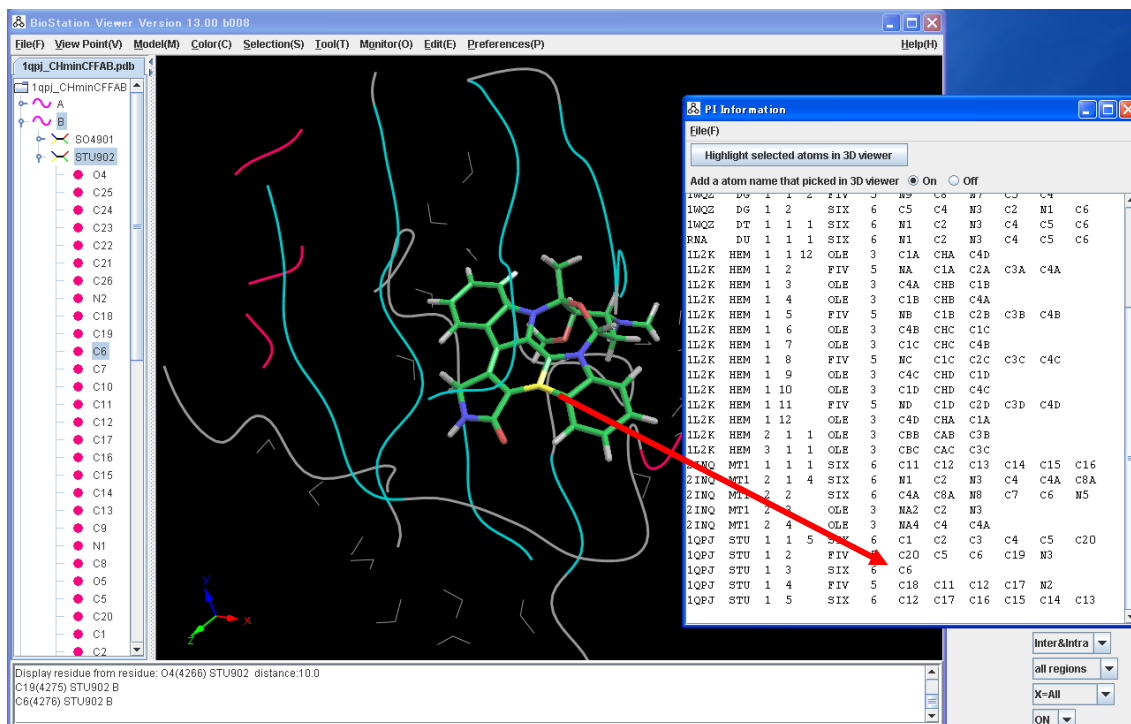
### 1) Highlight selected atoms in 3D viewer

編集領域で選択されている原子が、3D表示でハイライト表示されます。



### 2) Add a atom name that picked in 3D viewer

On にすると、3D表示でクリックされた原子名がカーソル位置に挿入されます。



ファイルメニューを説明します。

1) **Open**

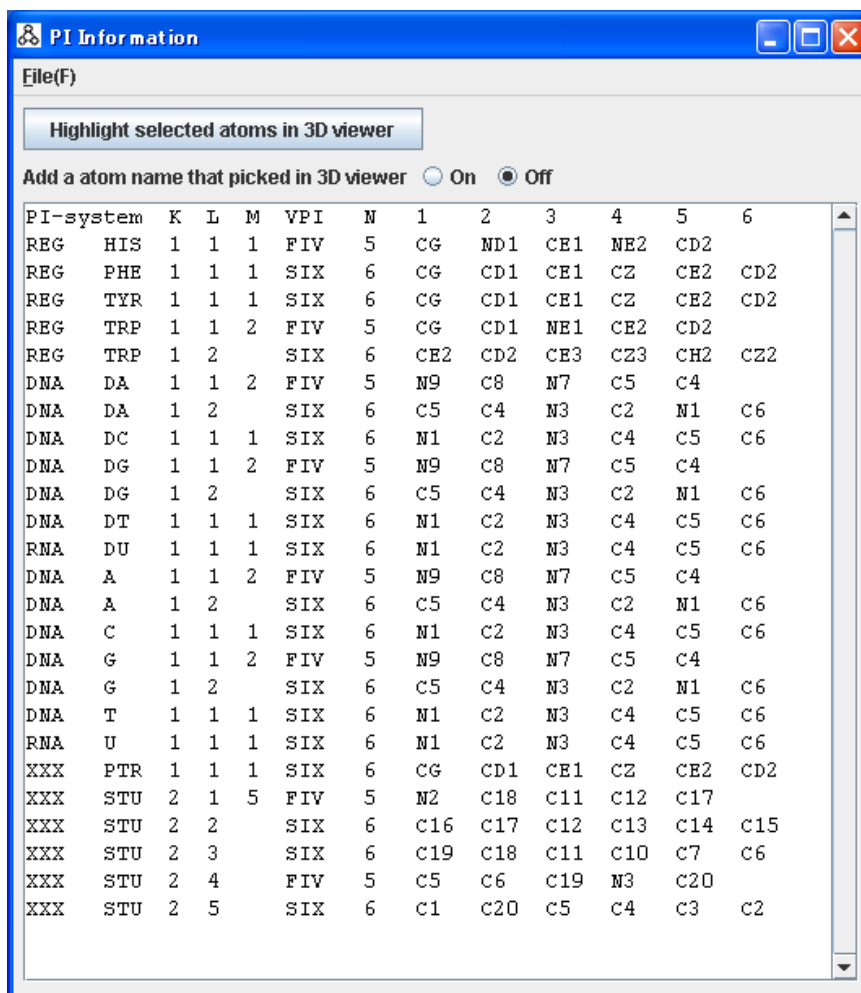
PI 情報ファイルを指定し入力します。ファイルの内容が GUI へ設定されます。

2) **Save**

指定されている内容をファイルに格納します。

3) **Set Default Value**

デフォルト値を設定します。アミノ酸、DNA,RNA の関しては、定型の情報が設定されます。それ以外は、PDB File で指定された PDB ファイルの HEM の部分の環を認識して設定されます。認識して生成された情報の識別名は XXX となっています。認識できる範囲の複数の環をまとめて 1 つの要素とします。修正が必要な場合はユーザが編集可能です。1qpj\_CHminCFFAB.pdb の例を以下に示します。



The screenshot shows a window titled "PI Information" with a "File(F)" menu. Below the menu is a button "Highlight selected atoms in 3D viewer" and a radio button selection "Add a atom name that picked in 3D viewer" with "On" and "Off" options. The main area contains a table with columns: PI-system, K, L, M, VPI, N, 1, 2, 3, 4, 5, 6. The table lists various atoms and their parameters, including entries for XXX (PTR, STU).

PI-system	K	L	M	VPI	N	1	2	3	4	5	6	
REG	HIS	1	1	1	FIV	5	CG	ND1	CE1	NE2	CD2	
REG	PHE	1	1	1	SIX	6	CG	CD1	CE1	CZ	CE2	CD2
REG	TYR	1	1	1	SIX	6	CG	CD1	CE1	CZ	CE2	CD2
REG	TRP	1	1	2	FIV	5	CG	CD1	NE1	CE2	CD2	
REG	TRP	1	2		SIX	6	CE2	CD2	CE3	CZ3	CH2	CZ2
DNA	DA	1	1	2	FIV	5	N9	C8	N7	C5	C4	
DNA	DA	1	2		SIX	6	C5	C4	N3	C2	N1	C6
DNA	DC	1	1	1	SIX	6	N1	C2	N3	C4	C5	C6
DNA	DG	1	1	2	FIV	5	N9	C8	N7	C5	C4	
DNA	DG	1	2		SIX	6	C5	C4	N3	C2	N1	C6
DNA	DT	1	1	1	SIX	6	N1	C2	N3	C4	C5	C6
RNA	DU	1	1	1	SIX	6	N1	C2	N3	C4	C5	C6
DNA	A	1	1	2	FIV	5	N9	C8	N7	C5	C4	
DNA	A	1	2		SIX	6	C5	C4	N3	C2	N1	C6
DNA	C	1	1	1	SIX	6	N1	C2	N3	C4	C5	C6
DNA	G	1	1	2	FIV	5	N9	C8	N7	C5	C4	
DNA	G	1	2		SIX	6	C5	C4	N3	C2	N1	C6
DNA	T	1	1	1	SIX	6	N1	C2	N3	C4	C5	C6
RNA	U	1	1	1	SIX	6	N1	C2	N3	C4	C5	C6
XXX	PTR	1	1	1	SIX	6	CG	CD1	CE1	CZ	CE2	CD2
XXX	STU	2	1	5	FIV	5	N2	C18	C11	C12	C17	
XXX	STU	2	2		SIX	6	C16	C17	C12	C13	C14	C15
XXX	STU	2	3		SIX	6	C19	C18	C11	C10	C7	C6
XXX	STU	2	4		FIV	5	C5	C6	C19	N3	C20	
XXX	STU	2	5		SIX	6	C1	C20	C5	C4	C3	C2

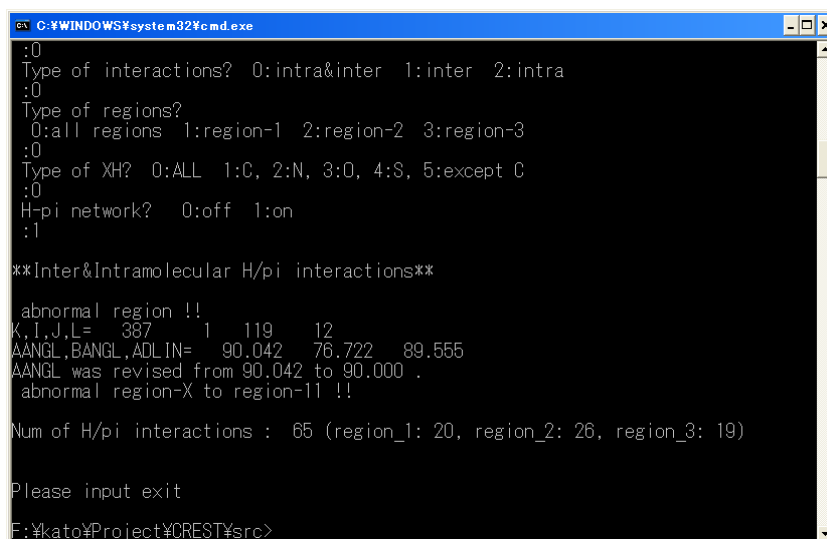
図 3.75 1qpj\_CHminCFFAB.pdb のデフォルト PI 情報

4) **Close**

画面を閉じます。

### 3.9.4 起動

**Execute CHPI Program** ボタンをクリックすると実行が開始されコマンドプロンプトにログが表示されます。



```
C:\WINDOWS\system32\cmd.exe
:0
Type of interactions? 0:intra&inter 1:inter 2:intra
:0
Type of regions?
0:all regions 1:region-1 2:region-2 3:region-3
:0
Type of XH? 0:ALL 1:C, 2:N, 3:D, 4:S, 5:except C
:0
H-pi network? 0:off 1:on
:1

**Inter&Intramolecular H/pi interactions**

abnormal region !!
K,I,J,L= 387 1 119 12
AANGL,BANGL,ADLIN= 90.042 76.722 89.555
AANGL was revised from 90.042 to 90.000 .
abnormal region-X to region-11 !!

Num of H/pi interactions : 65 (region_1: 20, region_2: 26, region_3: 19)

Please input exit
F:\kato\Project\CREST\src>
```

図 3.76 CHPI 実行のコマンドプロンプト

終了したら、これを閉じます。すると、結果が 3D 表示に表示されます。1 つの相互作用が **CHPI<sub>n</sub>** (nは通し番号) という残基名で表示され、3D 表示上でクリックするとメッセージエリアに距離が表示されます。表示形式は、**Preference** 指定で変更できます。図 3.77–図 3.79 に表示例を示します。

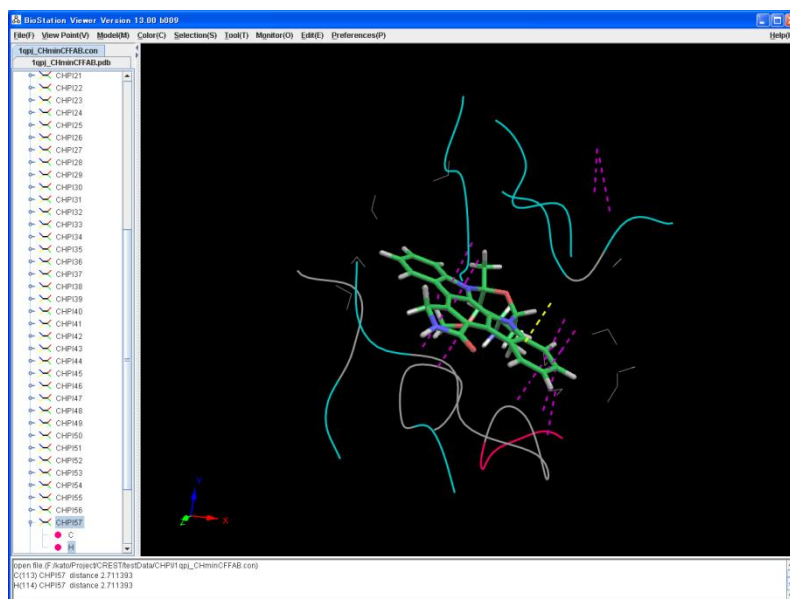


図 3.77 CHPI 結果表示 (CHP57 をクリック)

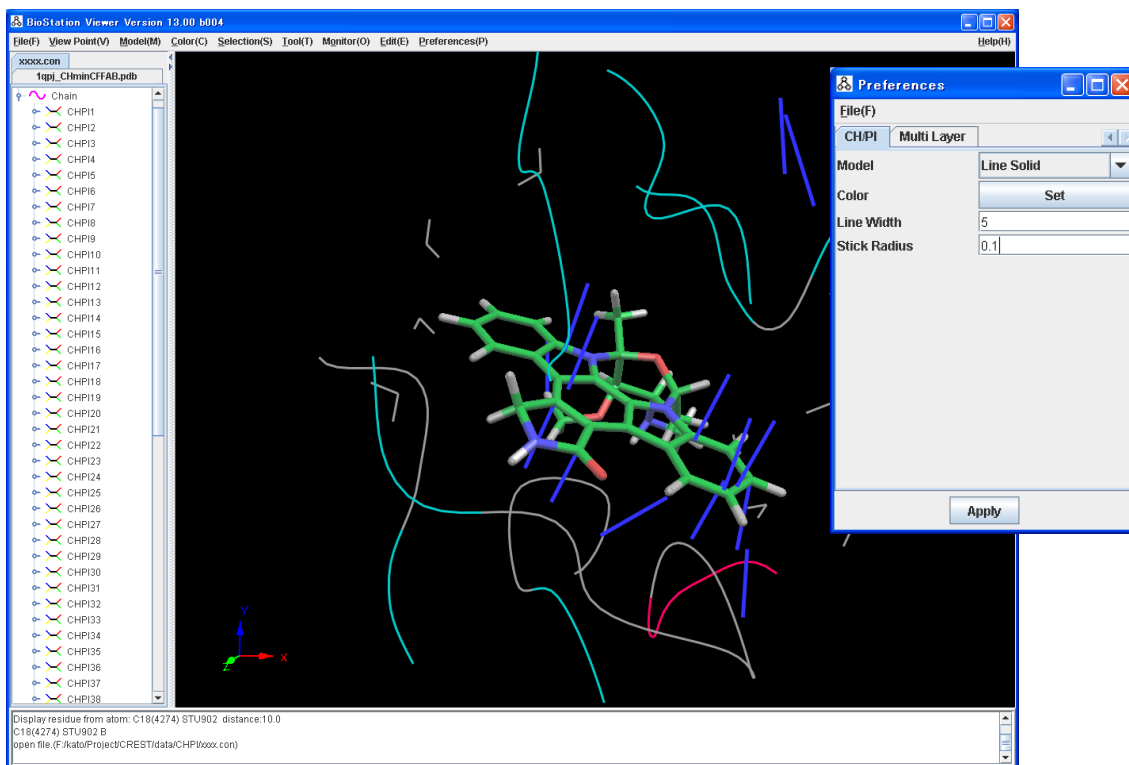


図 3.78 Preference で表示形式変更(Model を Line Solid,色を青)

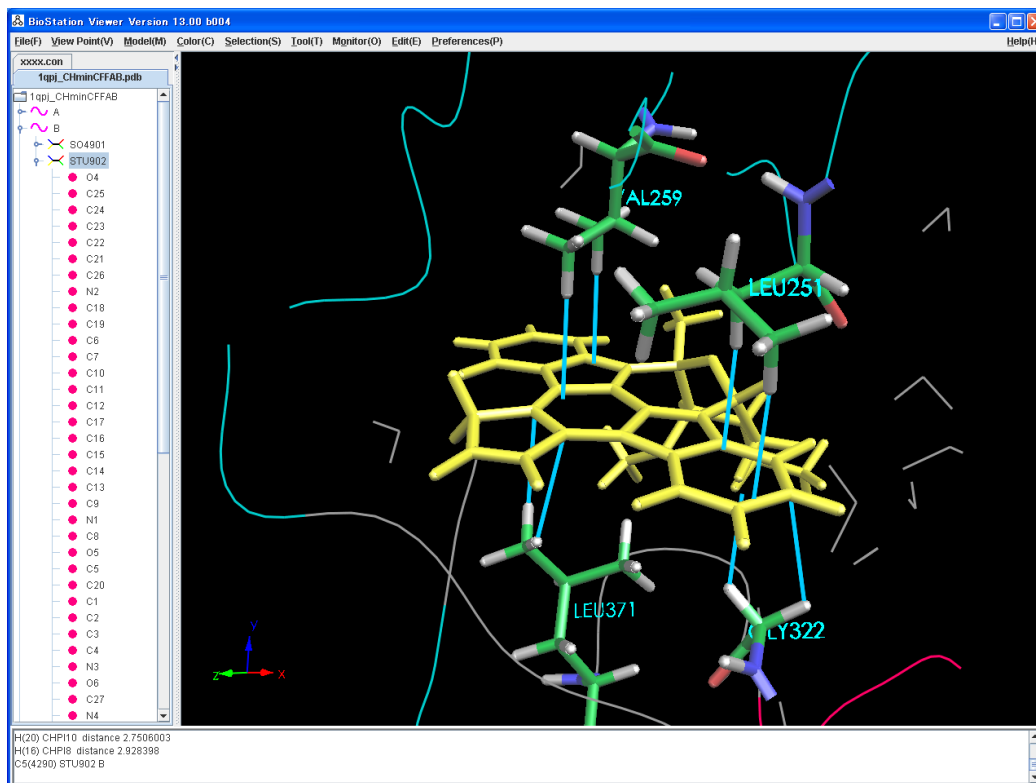


図 3.79 周辺の残基をスティック形式でラベルも表示

### 3.10 CNS 形式の電子密度グリッドデータの解析例

BioStation Viewer では X 線結晶解析等の実験で得られた CNS 形式の電子密度と FMO 法に基づいて計算した電子密度を比較することができます。

#### 3.10.1 AJF ファイルの作成例

CNS 形式での電子密度データを出力するには、ABINIT-MP Input File ウィンドウの GRIDCNTRL タブにて CNS formatted Electron Density (\*.cns) にチェックを入れます(図 3.80)。ここで、X 線結晶解析等の実験で得られた電子密度と ABINIT-MP で計算される電子密度を比較するためには実験データに用いられてものと同じグリッドポイントで電子密度を計算する必要があります。実験データの CNS ファイルがある場合は、図 3.80 に示す Import ボタンを用いて実験データに用いられているものと同じグリッドを指定することができます。

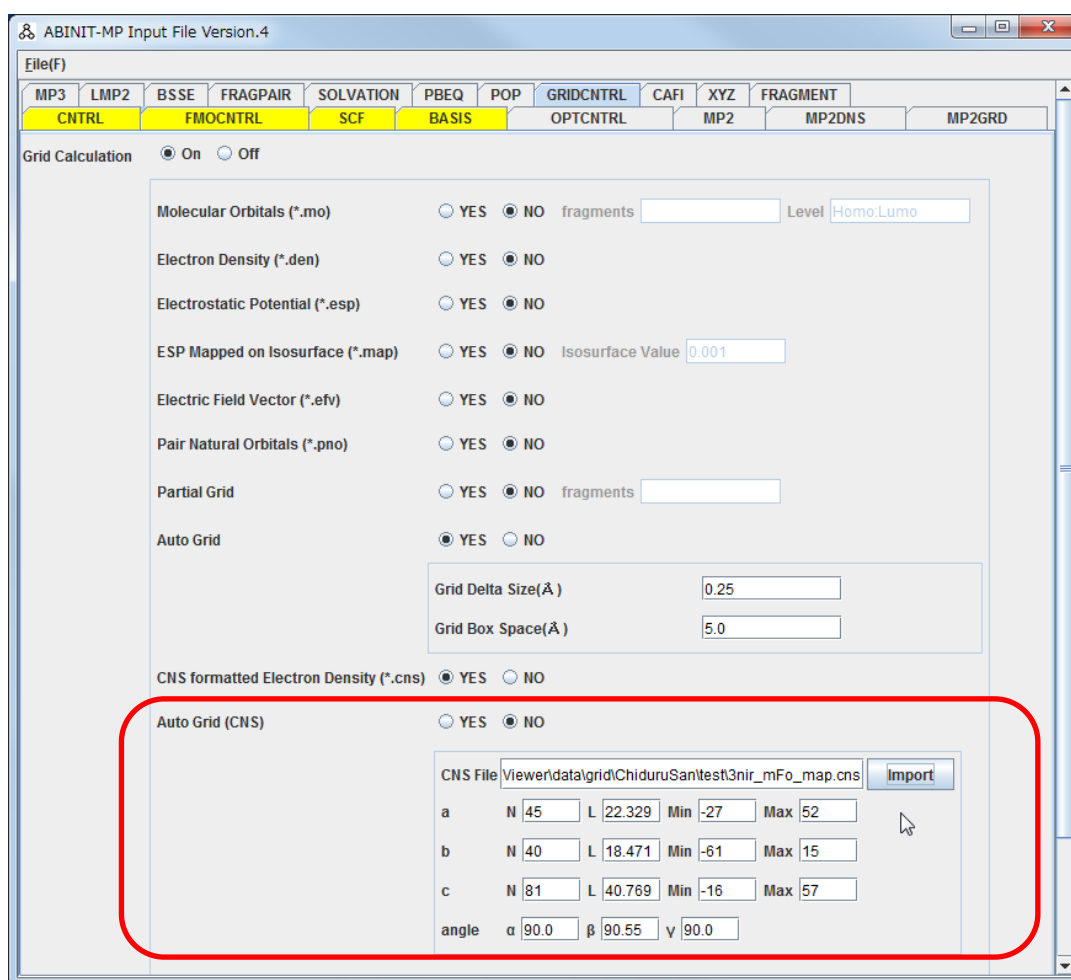


図 3.80 GRIDCNTRL タブ画面

### 3.10.2 CNS 形式の電子密度グリッドデータの表示例

CNS ファイルを BioStation Viewer の画面にドラッグ&ドロップすることで CNS 形式の電子密度グリッドデータのファイルを読み込むことができます。

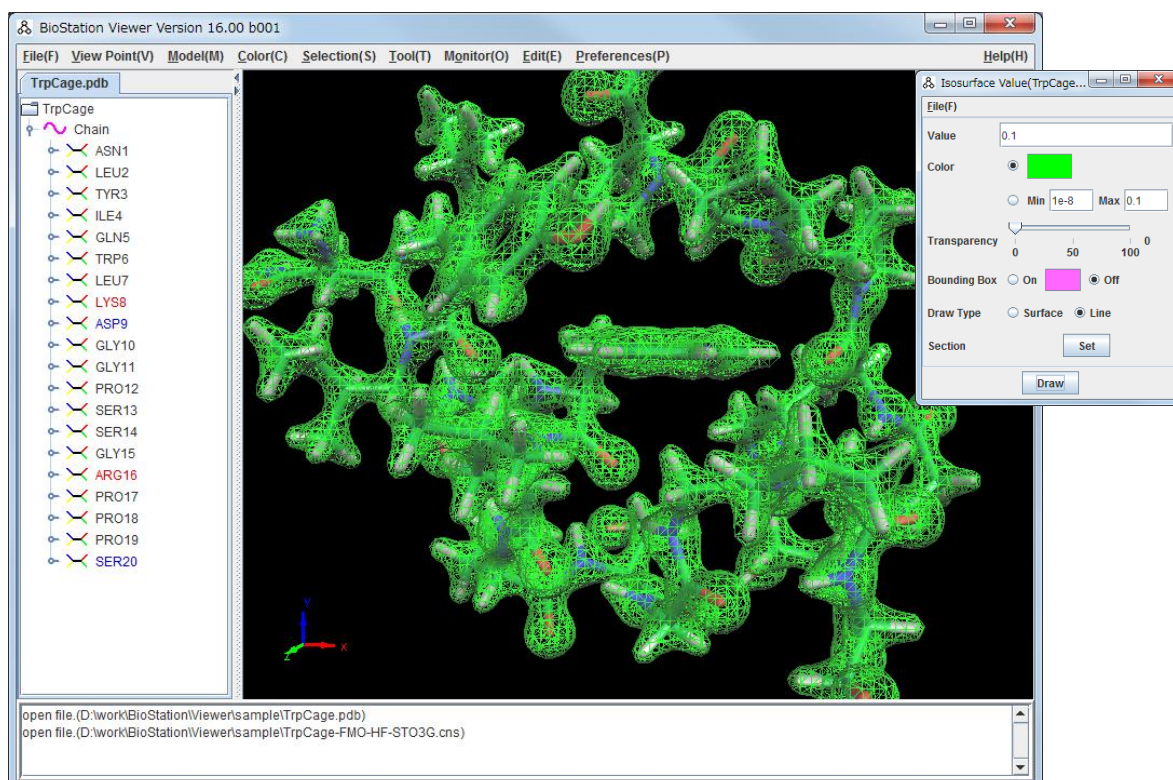


図 3.81 CNS 形式の電子密度グリッドデータを BioStation で読み込み・表示  
0.1 e/Å<sup>3</sup>の等値面を表示

### 3.10.3 タンパク質周囲の電子密度のみを抽出する例

電子密度を読み込んだのちに表示される Isosurface Value ウィンドウの Tool → Extract Density を実行し、電子密度の切り出しを行うことができます。また、切り出した電子密度を File → Save File により CNS 形式のファイルに保存することができます。



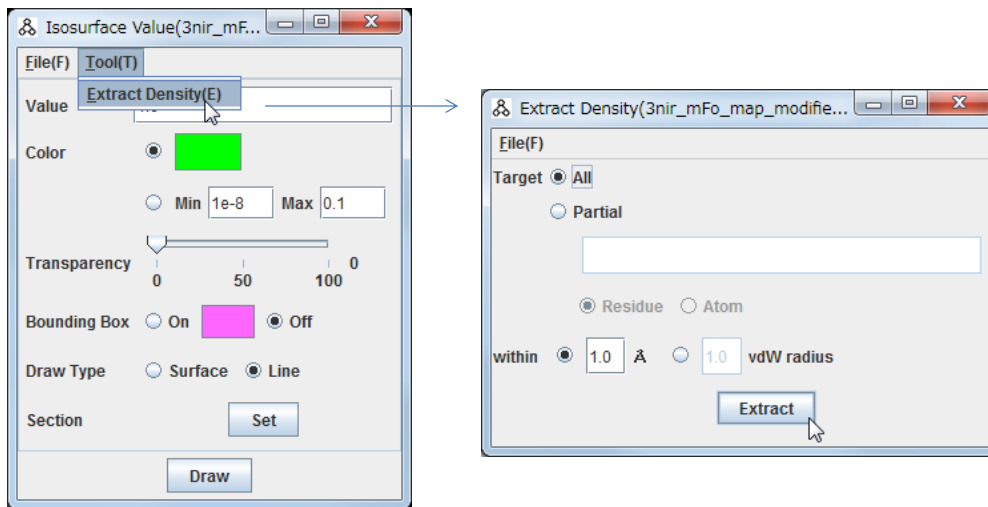
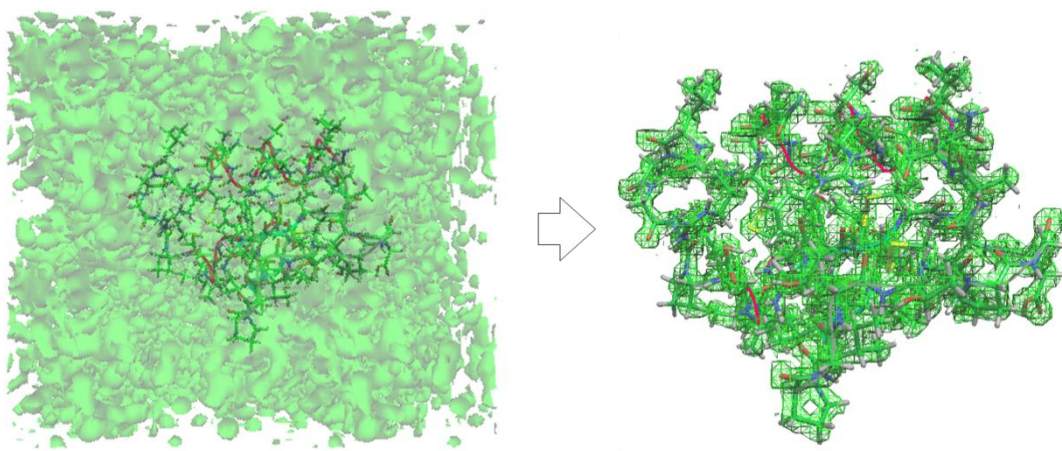


図 3.82 電子密度の切り出し操作を行うための GUI



(a) 実験結果に基づく電子密度

(b) 原子座標を基に切り出した電子密度

図 3.83 Crambin(3NIR)の実験結果に基づく電子密度の切り出し(1.0 Å)。  
1.0 e/Å<sup>3</sup>の等値面を表示

### 3.10.4 タンパク質周囲の電子密度のみを抽出する例

Monitor → Compare Density Files から複数のグリッドデータを数値的に比較できます。以下は Crambin(3NIR)の実験結果に基づく電子密度と FMO 計算(FMO-MP2/6-31G\*)に基づく電子密度に関して ARG10 の 1.0 Å 周辺の電子密度を比較した結果です。2 つの電子密度の差分が Viewer の立体構造表示画面に表示され、メッセージパネルに電子密度の差分の絶対値の平均値(average of  $abs(\Delta \rho)$ )が表示されます。電子密度の差分は File->Save File から CNS 形式に保存できます。

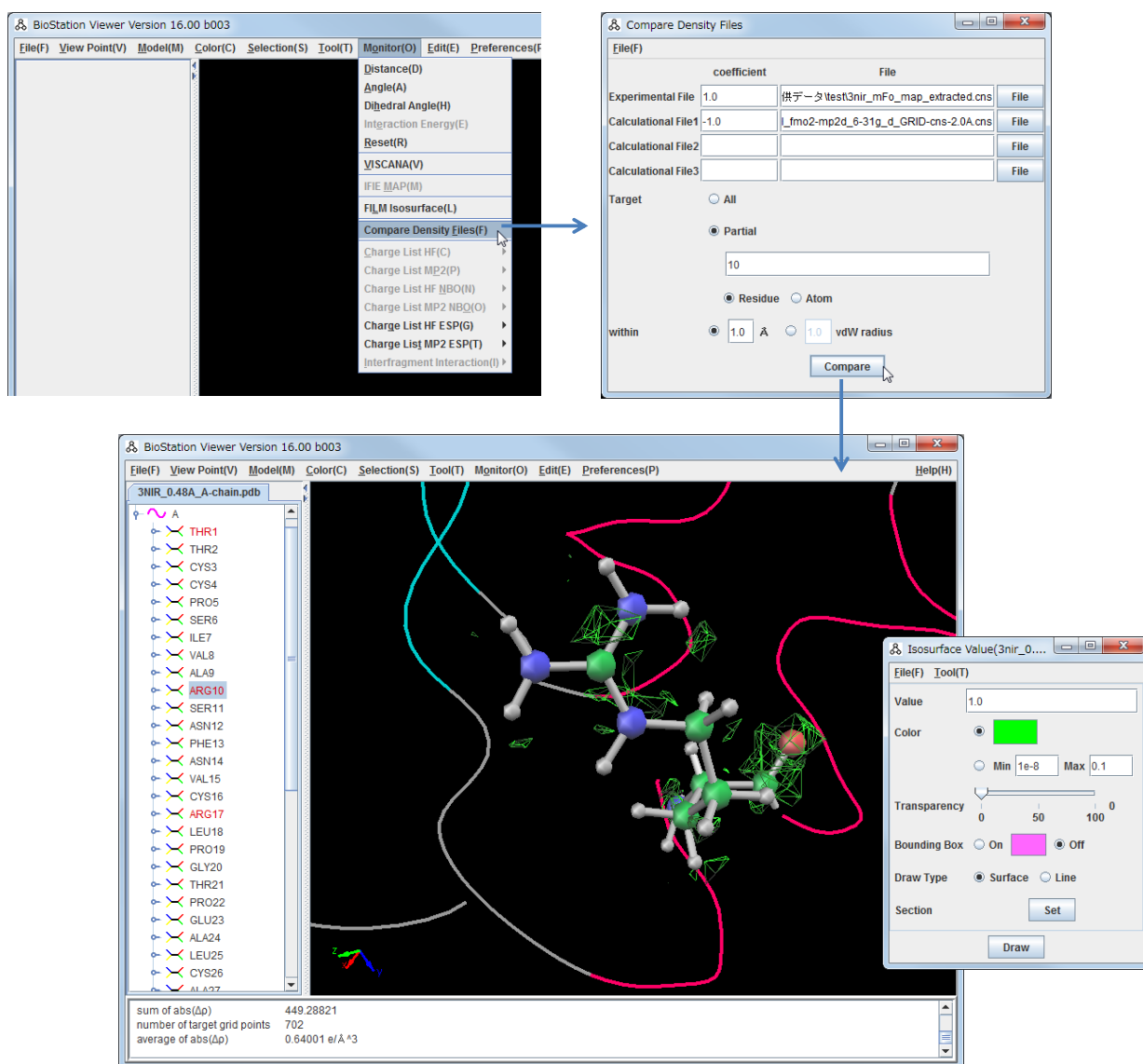


図 3.84 Crambin(3NIR)の実験結果に基づく電子密度と FMO 計算(FMO-MP2/ 6-31G\*)に基づく電子密度の ARG10 の 1.0 Å 周辺の差分電子密度。1.0 e/Å<sup>3</sup> の等値面を表示



## 4 チュートリアル

### 4.1 (Gly)10 の分子内相互作用解析

グリシン 10 残基 ( $\alpha$ -ヘリックス型) の計算例を示します。フラグメント分割は1残基単位とし、FMO-HF/STO-3G レベルの計算をおこないました。

#### 4.1.1 構造作成

Viewer を起動して、File→MOLDA を選択し、MOLDA の画面を表示します。Model→input→Peptideを選択すると、Peptide 入力画面が表示されます。ここで、グリシンの略号 g を 10 個入力し”OK”ボタンをクリックするとグリシンが表示されます。以下に入力画面を示します。

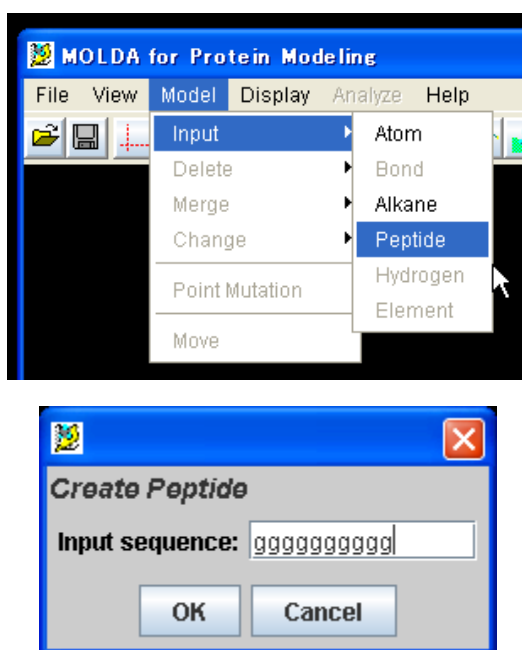
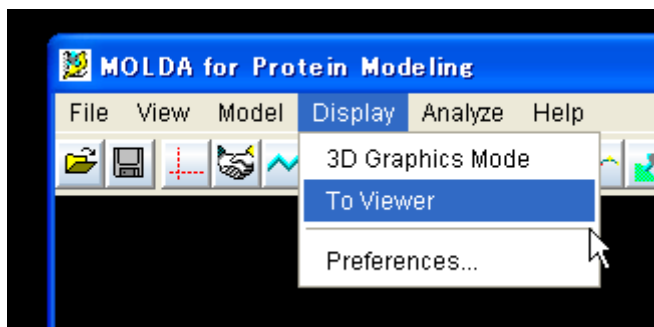


図 4.1 グリシンの入力指定

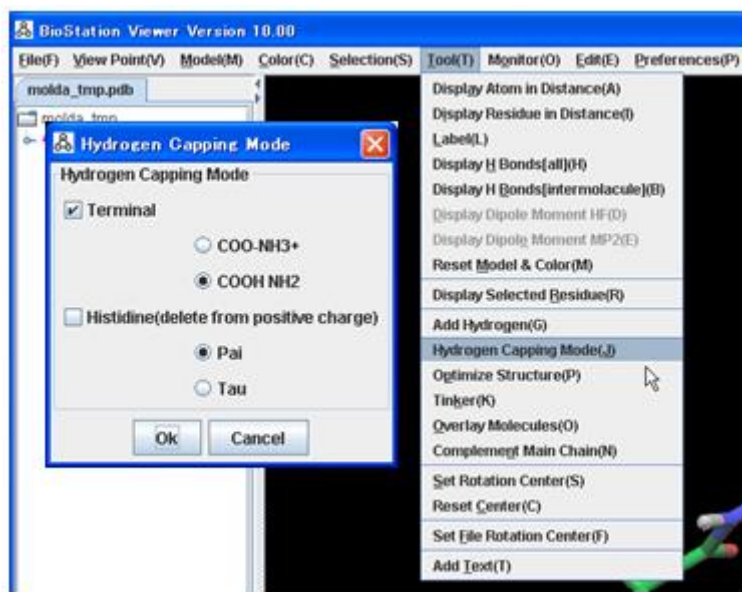
構造が表示されたら、File→Display→To Viewer で、構造を Viewer に渡します。Viewer へは、molda\_tmp.pdb というファイル名で表示されます。



#### 4.1.2 構造最適化

Viewer を起動したカレントフォルダにファイルはあるので、ファイル名を、gly10.pdb に変更して File→Close File で一度表示を消して、gly10.pdb を File→Open File で読み込みます。

Tool→Hydrogen Capping Mode をクリックし、末端処理として、Terminal にマークし COOH NH<sub>2</sub> を選択し、”OK”ボタンをクリックします。



末端処理の指定

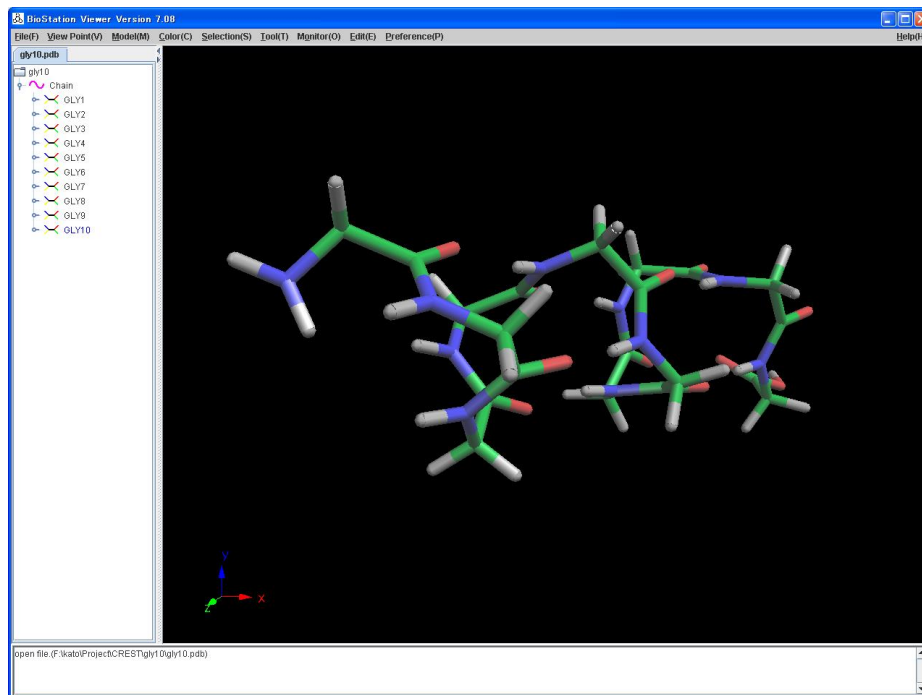


図 4.2 末端処理後の構造 (Stick 表示)

Tool→Optimize structure で構造最適化指定画面が表示されます。構造最適化は、水素付加のオプションファイル、構造最適化のオプションファイル、入力構造ファイルを指定し“OK”をクリックします。指定例を以下に示します。

※日本語やスペースを含む Path を指定すると正常に動作しないことがあるため注意する事。

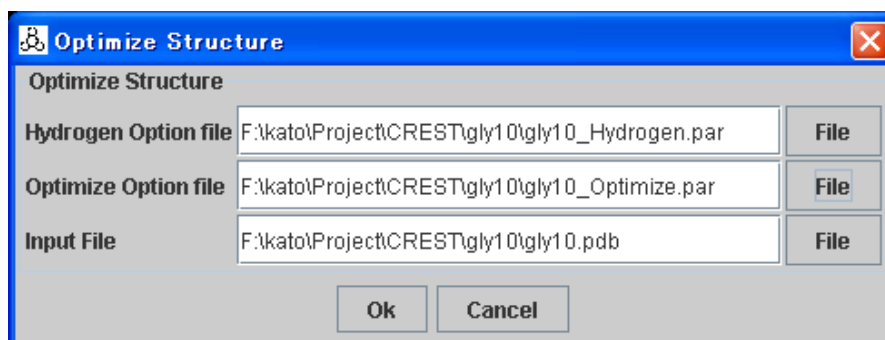


図 4.3 構造最適化の指定

構造最適化が実行され表示されます。結果ファイル名は gly10\_H\_opt.pdb であり、入力ファイルに\_H\_opt が付加されたものになります。オプションファイルの内容は、以下のようになっていて、構造最適化で指定可能なオプションを記述しておきます。オプションの詳細は、5 章に示します。

ここで、アミノ酸の水素付加、構造最適化は、独自開発のプログラム(an eXtended Universal Force Field Universal Force Field (XUFF))で行っています。

gly10\_Hydrogen.par

```
-B  
-R
```

gly\_Optimize.par

```
-O  
-h  
OPTIMIZATION 100  
SDLOOP 100  
MAXLOOP 500  
SDGRADIENT 1000.0.  
CGGRADIENT 0.1  
RGRADIENT 0.1  
REENERGY 0.0001
```

#### 4.1.3 計算実行

BioStation Viewer に gly10\_H\_opt.pdb が表示されている事を確認したうえで、File→Edit

ABINIT-MP Input File を選択し入力ファイル指定画面を表示します。入力項目を指定し、ファイルを格納し、そのファイルを使用し ABINIT-MP を実行します。

Read Geometry File, Write Geometry は、計算サーバでのディレクトリに修正してから ABINIT-MP を実行してください。

ABINIT-MP Input File Version 3

File(F)

MP2 MP2DNS MP2GRD MP3 LMP2 DFT BSSE FRAGPAIR POP XYZ FRAGMENT

CNTRL FMOCTRL SCF BASIS OPTCNTRL MFMO

FMO Calculation  On  Off

FMO3 Calculation  On  Off

LMO Type ANO

Auto Fragmentation  On  Off

Number of Residue for each Fragment 1

Polynucleotide Base+Suger+Phosphate

Ligand Charge

Number of Fragment 0

Approximation Level(pte) 2.0

Approximation Level(aoc) 0.0

Threshold of Dimer 2.0

Dimer ES Multipole  On  Off Max Order Multipole 10 Ldimer CMM 5.0

Number of CPU 1

Max SCC cycle 250

Max SCC Energy 5.0E-7

Write SCC File File

Read SCC File File

Write Monomer MP2 File File

Read Monomer MP2 File File

Write Dimer ES File File

Read Dimer ES File File

Write Dimer File  YES  NO

Read Dimer File  YES  NO

Dimer directory Browse

Read Initialize MO  YES  NO

IJ Pair

I Pair

Calculate Dimer  YES  NO

Read LMO C File

Read LMO Si File

MP2 MP2DNS MP2GRD MP3 LMP2 DFT BSSE FRAGPAIR POP XYZ FRAGMENT

CNTRL FMOCTRL SCF BASIS OPTCNTRL MFMO

Max SCF Energy 1.0E-8

Max SCF Density 1.0E-6

Max SCF Cycle 150

Alter MO 0

V Shift 0.0

K Shift 0.0

L Shift 0.0

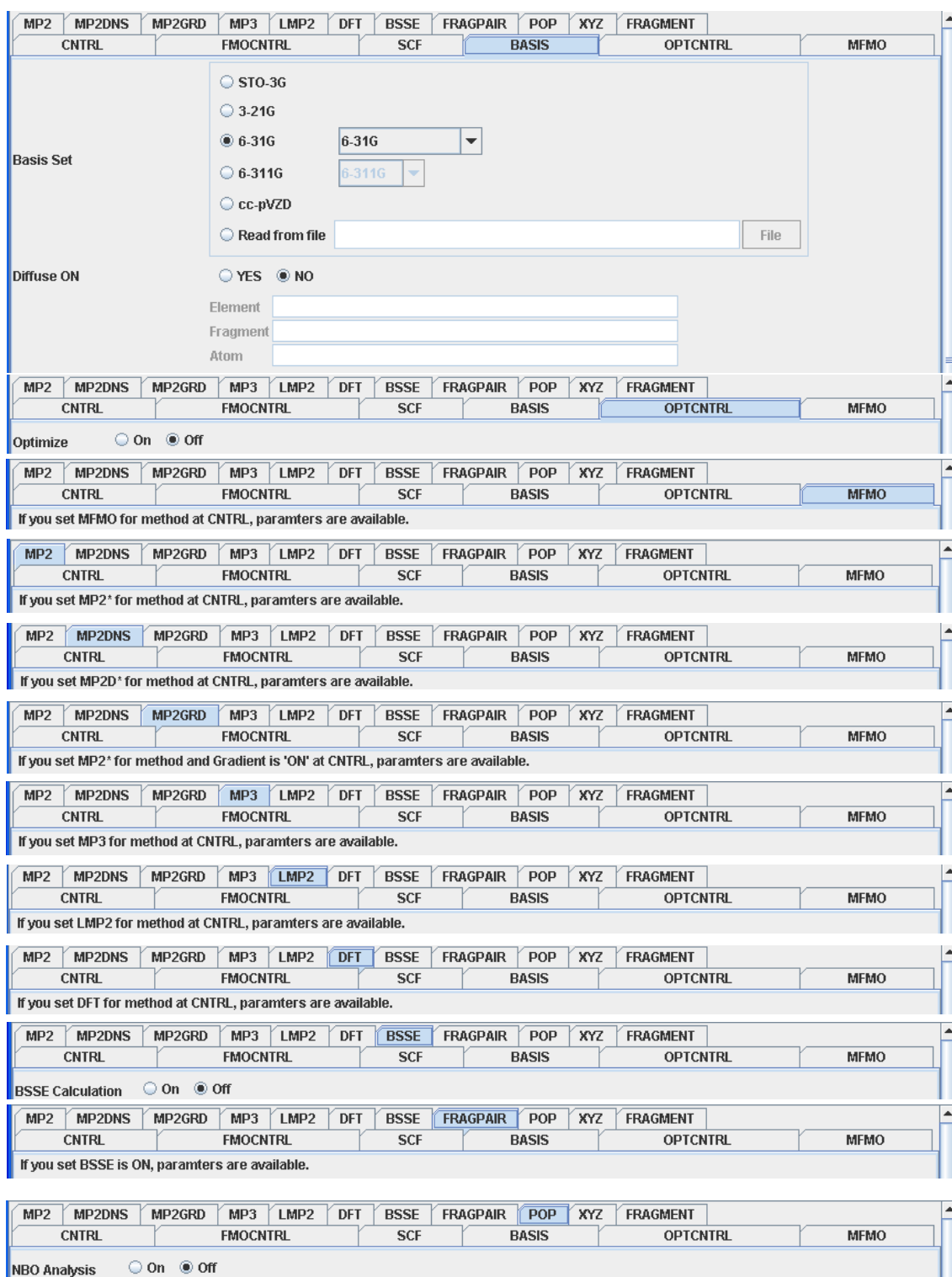


図 4.4 ABINIT-MP 入力 の 指 定

#### 4.1.4 計算結果

以上のように、モデリングを行い、XUFF 力場を用いて水素付加および構造最適化を行

った構造に対する、FMO 計算結果を示します (1)。また参考に、水素原子を最適化する前の構造を用いて FMO 計算を行った結果を示します (2)。

$\alpha$ -ヘリックスでは3フラグメント離れた残基ごとに水素結合が現れるため、 $n$  と  $(n+3)$  のフラグメント (残基) 間の相互作用エネルギーが安定化している様子がわかります。また、XUFF 力場で水素原子の構造最適化を行うことにより、水素結合のところの相互作用が約 0.4 kcal/mol ずつ安定化しています。

#### (1) XUFF 力場による水素原子最適化構造の結果

##### 全エネルギー

```
=====
## FMO TOTAL ENERGY
=====
Nuclear repulsion =      5342.1817591836
Electronic energy =     -7458.3751057039
Total      energy =     -2116.1933465204
```

##### フラグメント間相互作用エネルギー(IFIE)

表 4.1 XUFF 力場で水素原子を最適化した構造の IFIE 解析(FMO-HF/STO-3G)

	Gly1	Gly2	Gly3	Gly4	Gly5	Gly6	Gly7	Gly8
Gly1								
Gly2								
Gly3	0.72							
Gly4	<b>0.46</b>	1.44						
Gly5	0.81	<b>-4.66</b>	1.85					
Gly6	0.61	-2.48	<b>-4.85</b>	1.95				
Gly7	0.24	-0.24	-2.40	<b>-4.73</b>	1.75			
Gly8	0.14	-0.16	-0.21	-2.39	<b>-4.72</b>	1.92		
Gly9	0.11	-0.26	-0.16	-0.22	-2.47	<b>-4.94</b>	1.84	
Gly10	0.10	-0.23	-0.41	-0.23	0.00	-2.54	<b>-7.71</b>	5.15

#### (2) MOLDA モデリング構造の結果

##### 全エネルギー

```
=====
## FMO TOTAL ENERGY
=====
Nuclear repulsion =      5352.4874175133
```

Electronic energy = -7468.6560823049  
 Total energy = -2116.1686647916

フラグメント間相互作用エネルギー(IFIE)

表 4.2 MOLDA でモデリングした構造の IFIE 解析(FMO-HF/STO-3G)

	Gly1	Gly2	Gly3	Gly4	Gly5	Gly6	Gly7	Gly8
Gly1								
Gly2								
Gly3	1.77							
Gly4	<b>0.77</b>	1.53						
Gly5	0.54	<b>-4.27</b>	1.47					
Gly6	0.55	-2.46	<b>-4.43</b>	1.56				
Gly7	0.27	-0.27	-2.41	<b>-4.34</b>	1.48			
Gly8	0.15	-0.17	-0.25	-2.41	<b>-4.29</b>	1.64		
Gly9	0.08	-0.25	-0.17	-0.26	-2.49	<b>-4.47</b>	1.57	
Gly10	0.10	-0.23	-0.40	-0.24	-0.01	-2.55	<b>-7.30</b>	5.04



## 4.2 受容体タンパク質と低分子リガンド化合物との結合性解析

受容体タンパク質と低分子リガンド化合物との結合性を解析する手順について、エストロゲン受容体(約 250 残基)と  $17\beta$ -エストラジオールとの結合を例に解説します。

本例は手順を解説するものであり、結果の妥当性については現在検討および改良を行っています。

受容体-リガンドの結合解析は以下の手順で行う。

- 1) 受容体-リガンド立体構造データのダウンロード
- 2) 受容体-リガンド立体構造モデリング
  - A) 主鎖の補完
  - B) 側鎖の補完
  - C) 水素原子の付加、構造最適化
- 3) 受容体-リガンド結合エネルギーの計算入力ファイル作成

#### 4.2.1 受容体ーリガンド立体構造データのダウンロード

タンパク質の構造データは、Protein Data Bank(PDB)から検索し、ダウンロードすることができます。エストロゲン受容体(ER)の構造データを入手する為には、検索キーワードを入力するか、もしくは直接 PDB ID を入力します。

手順1: webブラウザを立ち上げて、protein data bankのページ( <http://www.rcsb.org/pdb> ) を表示します。

手順1: エストロゲン受容体のリガンド結合ドメインと17β-エストラジオールとの結合体である 1ERE、およびDiethylstilbestrolとの結合体である3ERDをダウンロードします。ダウンロードは、1ERE、3ERDをキーインして”SEARCH”ボタンをクリックすると結果が表示されるので、右上の1EREのところで、マウスの右ボタンを押し、「対象をファイル名を指定して保存」を選択します。ダウンロードしたファイルは、それぞれEREoriginal.pdb、ERDoriginal.pdbの名前で保存します。

The screenshot shows the RCSB PDB Structure Explorer interface in Microsoft Internet Explorer. The search results for 1ERE are displayed, including the title, authors, primary citation, history, experimental method, and parameters. A context menu is open over the 1ERE entry, showing options like '対象をファイルに保存(A)...'.

Resolution [Å]	R-value	R-Free	Space Group
3.10	0.218 (work)	0.251	P 2 <sub>1</sub> (P 1 2 <sub>1</sub> 1)

Unit Cell	Length [Å]	a	b	c	Angles [°]	alpha	beta	gamma
		61.48	115.16	137.38		90.00	98.80	90.00

図 4.5 PDB サイトで 1ERE を検索、ダウンロード

#### 4.2.2 BioStation Viewer で A 鎖のみに編集

ダウンロードしたファイル(1ERE,3ERD)は、エストロゲン受容体リガンド結合ドメインの 6 量体、2 量体であるので、あらかじめ BioStation Viewer の 2.2.8 節 Edit 編集機能の Cut(unselected) を使って単量体(A chain)の部分のみにしておきます。ファイル名は、ERE.pdb, ERD.pdb とします。

#### 4.2.3 ERD より主鎖を補完

ダウンロードしてきた PDB ファイルには、タンパク質の主鎖および側鎖が部分的に欠損していることがあります。この欠損部分は、ダウンロードした PDB ファイルをテキスト表示することによって確認します。

テキスト表示をすると、原子の座標データの前の REMARK セクションに欠損している部分に関する情報が記載されています。

MISSING ATOM → 側鎖中に欠損している原子

RESIDUES MISSING FROM THE PDB ENTRY DUE TO DISORDER

→ 主鎖の欠損部分

側鎖中の原子が欠損している場合は側鎖の残基ごと置き換えます。主鎖が欠損している場合は、公開されている同じ受容体の PDB データから該当部分を探して切り取り、貼り付けます。

ERE.pdb を確認すると、A 鎖のうち欠損しているのは

残基番号 306, 466, 469, 492, 531, 536 中の原子

残基番号 301-304, 331-336, 462-464, 549-553 の主鎖

であることがわかります。N 末端、C 末端が欠けている場合は削除できるので、ここでは A307-A547 までのペプチド鎖に対して欠損のない構造を作成することにします。主鎖の欠損部分に対しては、最初に ERE.pdb とともにダウンロードした Diethylstilbestrol との結合体 ERD.pdb から該当部分を切り出し、補完することにします

ERD.pdb の主鎖 331-336, 464-464 を確認すると、欠損しているのは

残基番号 332, 335, 464-464 中の原子

です。従って補完する必要があるのは、

**残基番号 331-336, 462-464 の主鎖**

**残基番号 332, 335, 462, 463, 464, 466, 469, 492, 531, 536 中の原子**

となりました。

ここで、Viewer を起動し補完をおこないます。メニューより File→Open File を選択し ERE.pdb を読み込みます。Tree 表示で、331-336,462-464 が欠損していることが確認できます。表示の

ModelをC $\alpha$  [Line]に変更し、Tree表示で、GLU330,PHE337を選択すると、3D表示で欠損部分が確認できます。同様にして462-464の確認もできます。

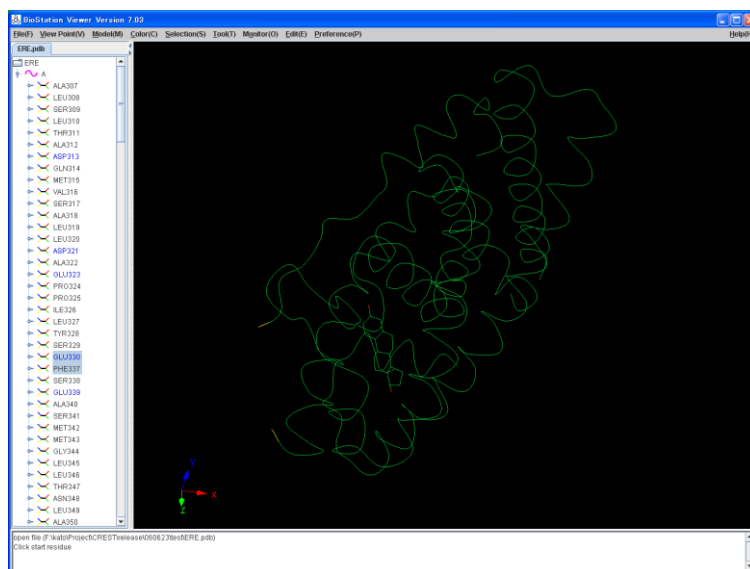


図 4.6 主鎖の欠損部分の表示

次に Tool→Complement Main Chain を選択し、補完に使用するファイル名(ERD.pdb)を指定し、”Apply”ボタンをクリックします。補完する主鎖の番号を指定しない場合は、欠損している部分を自動的に補完します。補完する主鎖の番号を指定する場合は、元の構造の端の残基を Tree 図上でクリックすることにより指定します。補完後のファイルは、Viewer 起動ディレクトリに元のファイル名(xxx)より、xxx\_complement.pdb として格納される。補完後の表示を図 4.6 に示します。

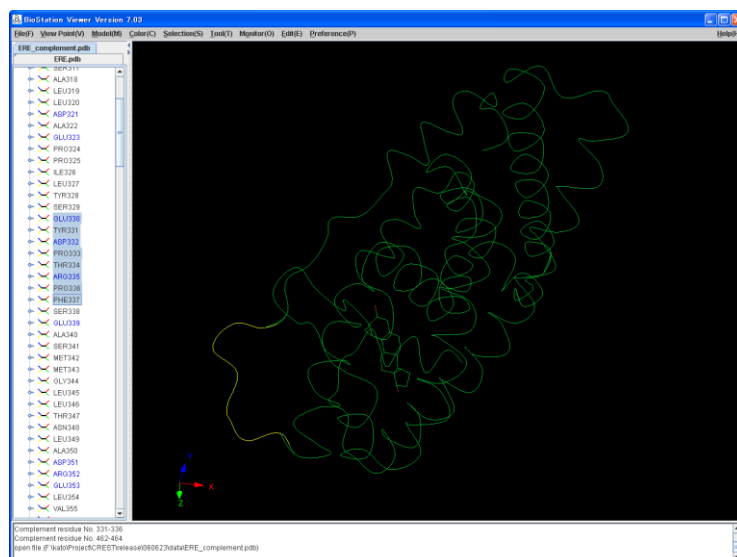


図 4.7 主鎖の欠損部分を補完

#### 4.2.4 原子欠損のある残基を Molda のポイントミューテーション機能で置き換える

編集機能 MOLDA を使用し、残基のポイントミューテーションを行います。3D 表示には、ERE.pdb も表示されているので、File→Delete File List を選択し、ERE.pdb は削除しておきます。File→Molda[with file]を選択すると、MOLDA が起動され分子構造が表示されます。View→Sequence Viewer を選択します。ポイントミューテーションする残基 ASP332 を選択し、“OK”をクリックします。該当部分が水色で表示されます。Model→Point Mutation を選択し、ASP と入力し、“OK”をクリックします。これで、ASP332 のミューテーションが行われる、残りの残基番号 335, 462, 463, 464, 466, 469, 492, 531, 536 についても同様に行います。この結果を Viewer で表示するために Display→To Viewer を選択します。ERE\_complement\_tmp.pdb として表示されます。ERE\_complement.pdb の表示は、必要ないので File→Delete File List で削除します。

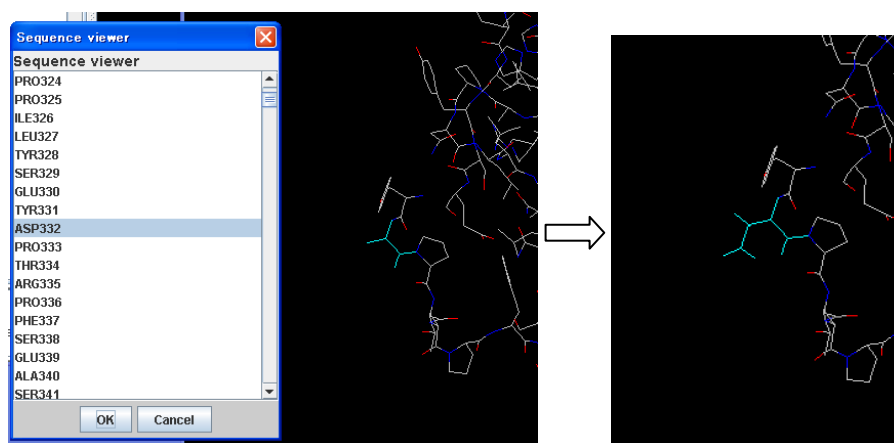


図 4.8 ASP332 のポイントミューテーション

#### 4.2.5 水素付加、構造最適化を実行。

末端処理を行うため Viewer でその処理を行う。Tool→Hydrogen Capping Mode を選択し、ここでは、COO-NH<sub>3</sub><sup>+</sup> を選択し、“OK” をクリックします。

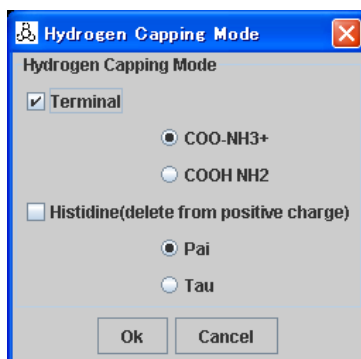


図 4.9 末端処理の指定

水素付加、構造最適化を行うため Tool→Optimize Structure を選択し、Hydorgen Option FileはERE\_Hydrogen.parを、Optimize Option Fileは、ERE\_Optimize.parを、Input Fileは、ERE\_complement\_tmp.pdb を入力し“OK“をクリックします。構造最適化が実行され表示されます。結果ファイル名はERE\_complement\_tmp\_opt.pdbであり、入力ファイルに\_H\_optが付加されたものになります。。水素が付加されただけの構造ファイルはERE\_complement\_tmp\_H.mol2 として保存されます。オプションファイルの内容は、以下のようになっています、構造最適化で指定可能なオプションを記述してきます。オプションの詳細は、5章に示します

ここで、低分子の水素付加は Babel で、アミノ酸の水素付加は、独自開発のプログラムで行っています。

#### ERE\_Hydrogen.par

```
-B  
-T  
-R  
-H d
```

#### ERE\_Optimize.par

```
-O  
-h  
SDLOOP 100  
CGLOOP 400  
MAXLOOP 500  
SDGRADIENT 1000.0.  
CGGRADIENT 0.1  
RGRADIENT 0.1  
REENERGY 0.0001  
ACTIVE_RESIDUE -331 336 -462 464  
ACTIVE_SIDECHAIN 466 469 492 531 536
```

この指定は、水素(-h)、主鎖補完したアミノ酸(ACTIVE\_RESIDUE)、ポイントミューレーションしたアミノ酸側鎖(ACTIVE\_SIDECHAIN)を構造最適化するものです。リガンドの構造を最適化したい場合は ACTIVE\_RESIDUE に PDF 中のリガンドの残基番号 600 を追加します。

#### 4.2.6 ABINIT-MP 入力ファイル作成

File→New ABINIT-MP Input File を選択し、入力ファイル指定画面を表示します。入力項目を指定し、ファイルを格納し、そのファイルを使用し ABINIT-MP を実行します。

Read Geometry File 以外は、前節のグリシンと同じ指定です。

ABINIT-MP Input File Version 3

File(F)

MP2DNS MP2GRD MP3 LMP2 DFT BSSE FRAGMENT PAIR POP XYZ FRAGMENT

CNTRL FMOCNTRL SCF BASIS OPTCNTRL MFMO MP2

Title ERE sample

Electronic State Singlet Closed shell

Method Hartree Fock

Print Level 3

Memory Size 1800

MPI Buffer Size 250

Number of Atom 0

Read Geometry File ERE\_complement\_tmp\_opt.pdb File

Write Geometry File File

CPF Version 3

Gradient  YES  NO

Log File File

Vector  On  Off Length

図 4.10 ABINIT-MP 入力ファイル作成画面

### 4.3 アライメント指定の VISCANA 機能

5 種の PDB 構造(PDBID: IERE, 1L2J, 1QKM, 1U3Q, 2I0G)からなるデータを例とし、アミノ酸配列アラインメント用いた VISCANA のためのデータ準備と使用方法について説明します。

#### 4.3.1 CPF ファイルの準備

FMO 計算を実行して、実行結果の CPF ファイルを取得する。すべての CPF ファイルは同一のフォルダ(以下、データフォルダ)に格納します。

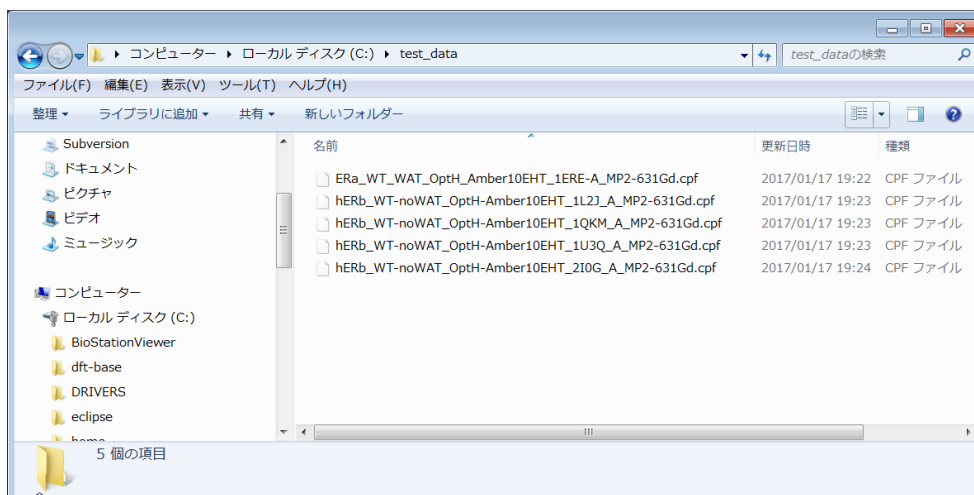


図 4.11 データフォルダへの CPF ファイルの格納 (名前で昇順ソート)

#### 4.3.2 配列データの取得

RCSB Protein Data Bank にて、PDBID をもとにアミノ酸配列データを取得します。PDBID の入力順は、対応する CPF ファイルを Windows のフォルダにて名前で昇順ソートした場合の順序と一致させます。

CPF ファイルの配列データ取得ウェブ画面(図 4.12)と、取得した配列データ(表 4.3)を示します。



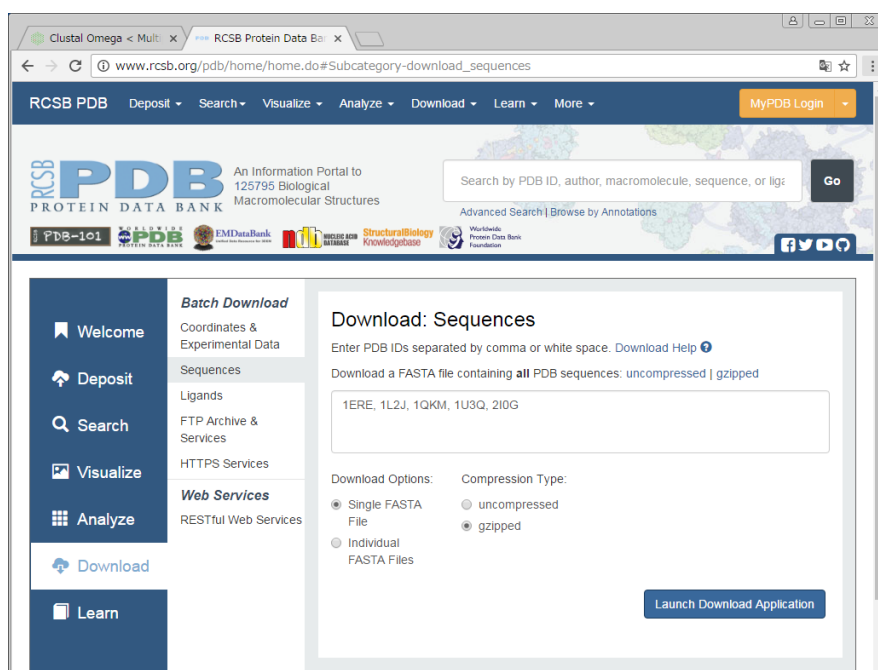


図 4.12 Protein Data Bank からデータ取得

表 4.3 Protein Data Bank からダウンロードした配列データ

```

>1ERE:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
SKKNSLALSLTADQMVSALLDAEPPILYSEYDPTTRPFSEASMMGLLTNLADRELVHMINWAKRVPGFVDLTLHDQVHLL
CAWLEILMIGLVWRSMHPGKLLFAPNLLDRNQGKCVEGMVEIFDMLLATSSRFRMMNLQGEEFVCLKSIILLNSGVYT
FLSSTLKSLEEKDHIHRVLDKITDTLIHLMAKAGLTLQQQHQRLAQLLLILSHIRHMSNKGMEHLYSMKCKNVVPLYDLL
LEMLDAHRLHAPT
>1L2J:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
MGSSHHHHHHSSGLVPRGSHMRELLLDALSPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAK
KIPGFVELSLFDQVRLLESCWMEVLMGLMWRSIDHPGKLIAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDMLLATSSRFRELKQHQ
KEYLCVKAMILLNNSMYPLVTATQDADSSRKLALLNAVTDALVWVIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGME
HLLNMKCKNVVVPYDILLEMLNAHVLRGCKS
>1QKM:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
VRELLLDALSPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESC
WMEVLMGLMWRSIDHPGKLIAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDMLLATSSRFRELKQHQKEYLCVKAMILLNNSMYPLV
TATQDADSSRKLALLNAVTDALVWVIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPYDILLE
LNAHVLRGCKSSITG
>1U3Q:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
DALSPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESCWMEVLM
MGLMWRSIDHPGKLIAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDMLLATSSRFRELKQHQKEYLCVKAMILLNNSMYPLVTATQDA
DSSRKLALLNAVTDALVWVIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPYDILLEMLNAHV
>2I0G:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
MHHHHHHRELLLDALSPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQV
RLLESCWMEVLMGLMWRSIDHPGKLIAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDMLLATSSRFRELKQHQKEYLCVKAMILLNS
SMYPLVTATQDADSSRKLALLNAVTDALVWVIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPY
DILLEMLNAHVLRGCKS

```

### 4.3.3 配列データの編集

3次元構造データであるPDBファイルに含まれるアミノ酸残基は、通常、Protein Data Bankからダウンロードして得られる配列データ(表 4.2)の一部です。そこで、ダウンロードした配列データからPDBファイルに含まれる残基のみを切り出したデータを作成します(表 4.3)。

配列の1行の文字数は、ダウンロードデータ(表 4.2)と同一でなくても良いです。では、各配列を1行にまとめています。

表 4.4 PDBファイルに含まれる残基のみを切り出した配列データ

```
>1ERE:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
SLTADQMVSALLDAEPPILYSEYDPTRPFSEASMMGLLTNLADRELVHMINWAKRVPGFVDLTLHDQVHLLCAWLEILM
IGLVWRSMHEHPGKLLFAPNLLDRNQKCVEGMVEIFDMLLATSSRFMMNLQGEEFVCLKSILLNSGVYTFLSSTLKSL
EEKDHIHRVLDKITDTLIHLMAKAGLTLQQQHQLAQLLLILSHIRHMSNKGMEHLYSMKCKNVVPLYDLLLEML
>1L2J:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
SPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESCWMEVLMGL
MWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDMLLATTSRFRELKLQHKEYLCVKAMILLNSSMYPLVTATQDADSSR
KLAHLLNAVTDALVWVIAKSGISSQQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPVYDLLLEMLNA
>1QKM:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
SPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESCWMEVLMGL
MWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDMLLATTSRFRELKLQHKEYLCVKAMILLNSSMYPLVTATQDADSSR
KLAHLLNAVTDALVWVIAKSGISSQQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPVYDLLLEMLNA
>1U3Q:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
SPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESCWMEVLMGL
MWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDMLLATTSRFRELKLQHKEYLCVKAMILLNSSMYPLVTATQDADSSR
KLAHLLNAVTDALVWVIAKSGISSQQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPVYDLLLEMLNA
>2I0G:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
SPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESCWMEVLMGL
MWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDMLLATTSRFRELKLQHKEYLCVKAMILLNSSMYPLVTATQDADSSR
KLAHLLNAVTDALVWVIAKSGISSQQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPVYDLLLEMLNA
```

#### 4.3.4 アラインメントデータの取得

EBI Clustal Omega にて切り出した配列データのアラインメントを行ないます。アラインメント実行ウェブ画面(図 4.13)と、アラインメント結果ファイル(表 4.5)を示します。

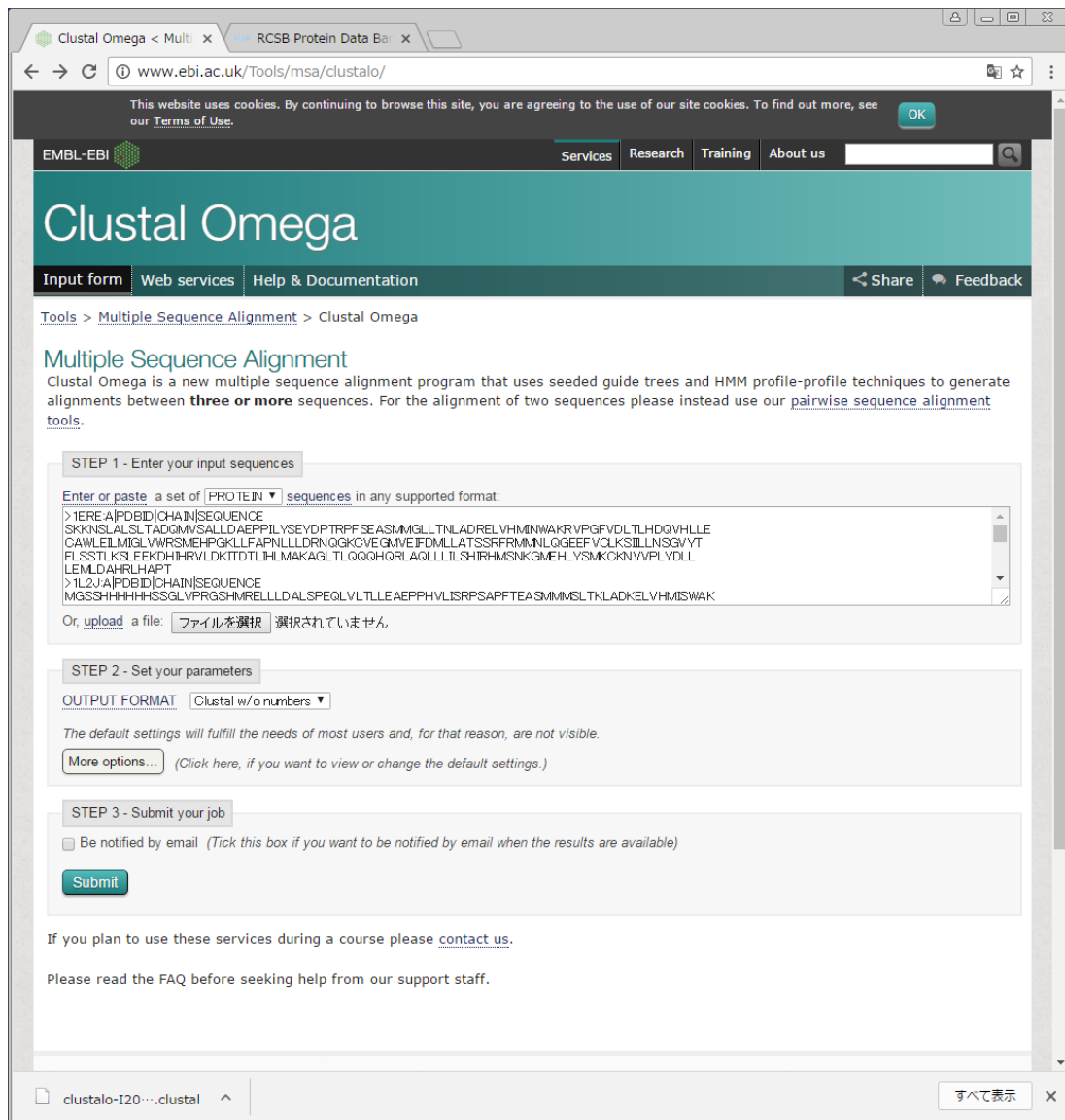


図 4.13 EBI/Clustal Omega でのアラインメント実行

表 4.5 アラインメント実行結果  
(clustalo-I20170117-043407-0256-70767858-pg.clustal)

CLUSTAL O(1.2.4) multiple sequence alignment

```
1ERE:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE
SLTADQMVSALLDAEPPILYSEYDPTRPFSEASMMGLLNLADRELVHMINWAKRVPGFV
```

1L2J:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 --SPEQLVLTLLAEPPHVLVLI-SRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFV  
 1QKM:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 --SPEQLVLTLLAEPPHVLVLI-SRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFV  
 1U3Q:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 --SPEQLVLTLLAEPPHVLVLI-SRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFV  
 2I0G:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 --SPEQLVLTLLAEPPHVLVLI-SRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFV

..\*.\* \*\*.\*\*\*\* : \*.\*.\*\*\*\* \*\*.\*.\*\*\*\* \*\*.\*.\*\*\*\* \*\*.\*.\*\*\*\*

1ERE:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 DLTLHDQVHLLCAWLEILMIGLVWRSMHPGKLLFAPNLLDRNQKCVEGMVEIFDML  
 1L2J:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 ELSLFDQVRLLESCWMEVLLMGLMWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDML  
 1QKM:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 ELSLFDQVRLLESCWMEVLLMGLMWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDML  
 1U3Q:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 ELSLFDQVRLLESCWMEVLLMGLMWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDML  
 2I0G:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 ELSLFDQVRLLESCWMEVLLMGLMWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVEGILEIFDML

..\*.\* \*\*.\*\*\*\* \*.\*.\*\*\*\* \*\*.\*.\*\*\*\* \*\*.\*.\*\*\*\* \*\*.\*.\*\*\*\* \*\*.\*.\*\*\*\*

1ERE:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 LATSSRFMMNLQGEFVCLKSIIILLNSGVYTFLSSTLKSLEEKDHIHRVLDKITDTLIH  
 1L2J:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 LATTSRFRELKLQHKEYLCVKAMILLNSSMYPLVTATQDA-DSSRKLHLLNAVTDALVW  
 1QKM:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 LATTSRFRELKLQHKEYLCVKAMILLNSSMYPLVTATQDA-DSSRKLHLLNAVTDALVW  
 1U3Q:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 LATTSRFRELKLQHKEYLCVKAMILLNSSMYPLVTATQDA-DSSRKLHLLNAVTDALVW  
 2I0G:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 LATTSRFRELKLQHKEYLCVKAMILLNSSMYPLVTATQDA-DSSRKLHLLNAVTDALVW

\*\*\*.\* \*\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\*

1ERE:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 LMAKAGLTQQHQRLAQLLLILSHIRHMSNKGMEHLYSMKCKNVVPLYDILLEML--  
 1L2J:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 VIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVPLYDILLEMLNA  
 1QKM:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 VIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVPLYDILLEMLNA  
 1U3Q:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 VIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVPLYDILLEMLNA  
 2I0G:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE  
 VIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVPLYDILLEMLNA

..\*.\* \*\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\* \*\*.\*.\*





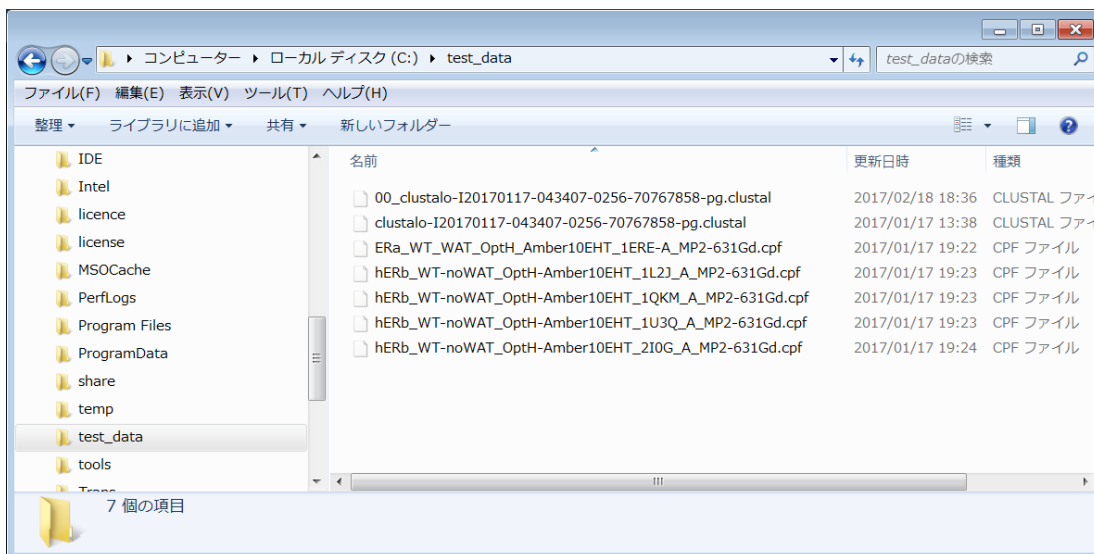


図 4.14 データフォルダへのアラインメントデータの格納

#### 4.3.7 VISCANA 実行

BioStation Viewer の「Monitor」メニューから「VISCANA」を選択して VISCANA ウィンドウを開きます。

VISCANA のウィンドウにて、「CPF Data Directory...」ボタンをクリックしてデータフォルダを設定します。次いで「Load」ボタンをクリックすると、データフォルダのアラインメントデータおよび CPF が読み込まれます。

「Apply」ボタンをクリックするとクラスター解析が行われ、結果が表示されます(図 4.15)。

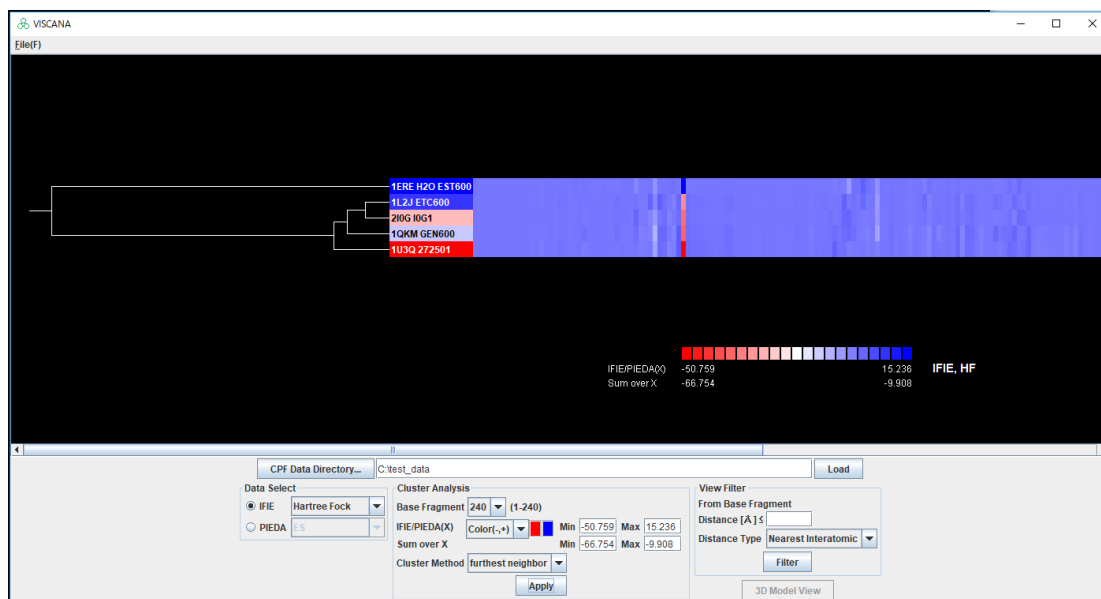


図 4.15 VISCANA ウィンドウ (アラインメント実行結果)

左下の「Data Select」から「IFIE」を選び、プルダウンから「MP2」を選び、「Apply」ボタンを押すとの図 4.16 ようになる。

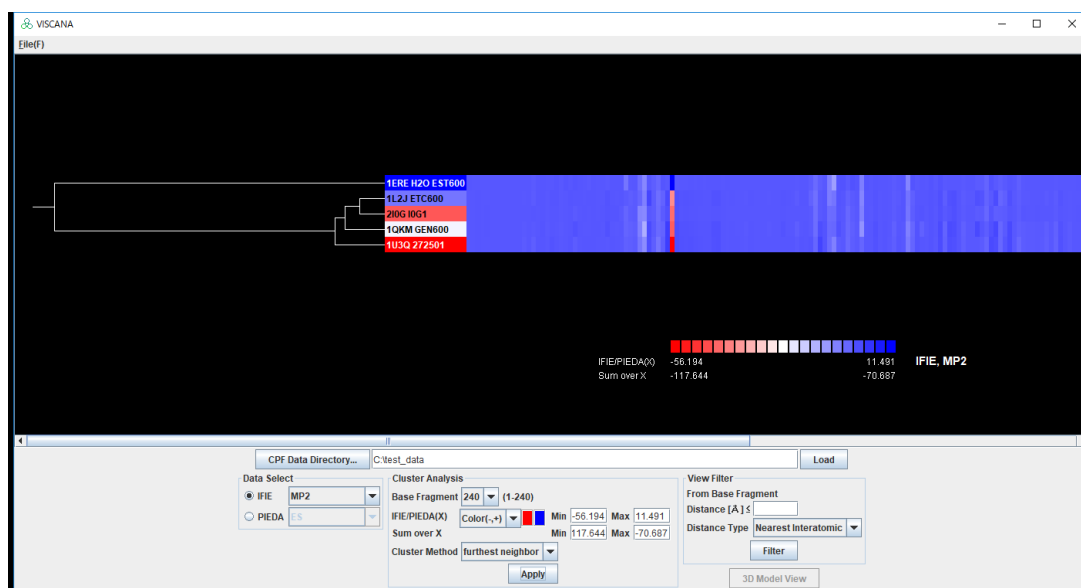


図 4.16 VISCANA ウィンドウ (IFIE, MP2 データ選択実行)

表示される色のスケールを変更するには、中央下のエネルギーの下限「Min」・上限「Max」を設定します。一度「Apply」ボタンを押すとデータの下限・上限が表示されます。この値を参考に「IFIE/PIEDA(X)」の下限を-20、上限を+20、「IFIE Sum over X」の下限を-50、上限を50とし、「Apply」ボタンを押すと、図 4.17 のように設定されて表示されます。

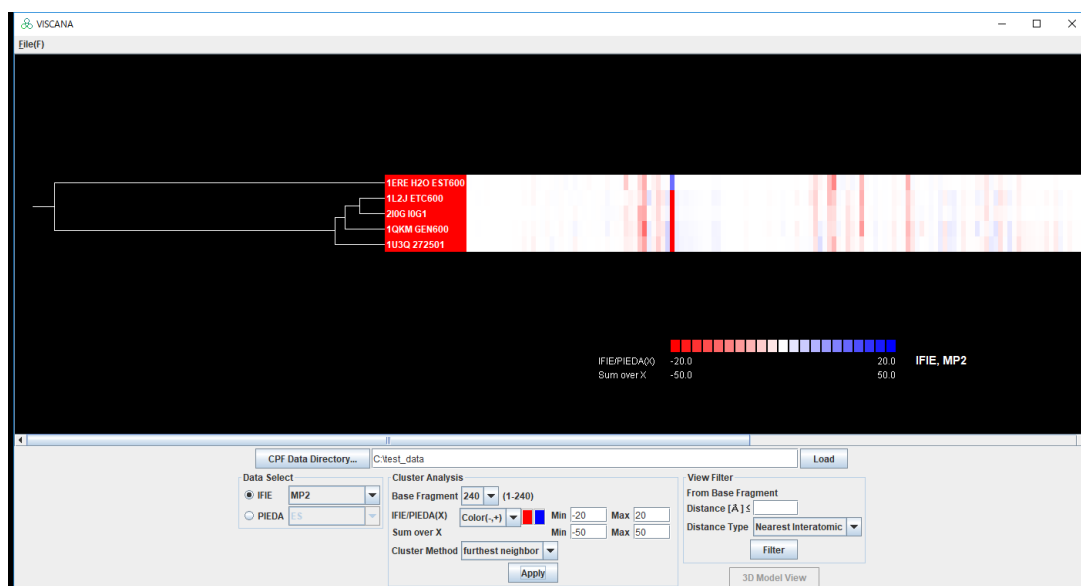


図 4.17 VISCANA ウィンドウ (カラースケール設定)



Base Fragment からの距離により、表示するフラグメント数を絞るためには、右下の「View Filter」の「Distance」に値を設定します。「Distance」に 15 (Å)を設定して、「Filter」ボタンを押すと、図 4.18 のようにフラグメントが限定されて表示されます。

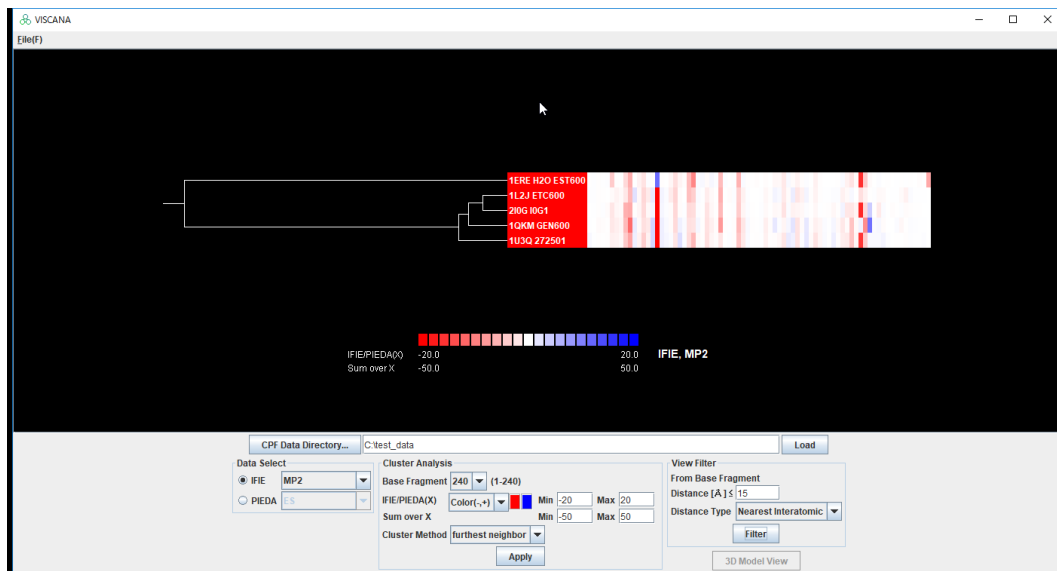


図 4.18 VISCANA ウィンドウ (フラグメントの絞込み)

VISCANA 実行後には、アラインメント配列情報を記載したファイル(sequence.txt)が出力されます(図 4.19)。sequence.txt には、アラインメントデータファイルの名前、配列の本数、各配列の PDBID・Chain、配列文字列、アミノ酸残基数、配列文字数が出力されます(表 4.7)。

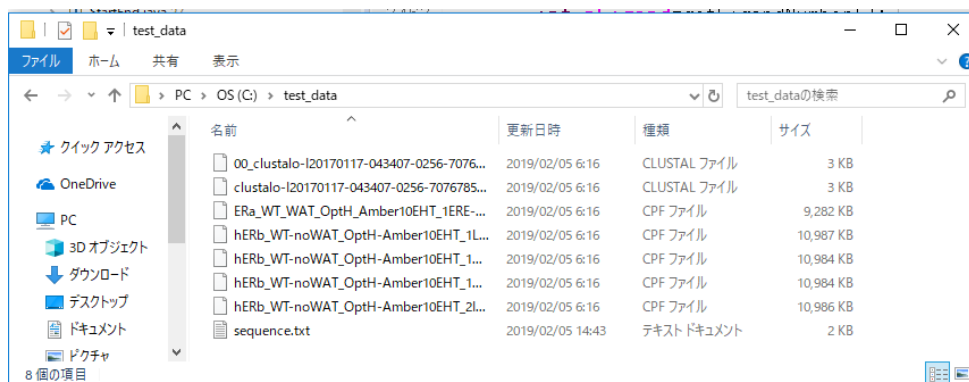


図 4.19 データフォルダ (VISCANA 実行後)

表 4.7 sequence.txt

```
C:\test_data\00_clustalo-l20170117-043407-0256-70767858-pg.clustal
#sequences : 5
1ERE|A|SLTADQMVSALLDAEPPILYSEYDPTRPFSEASMMGLLTNLADRELVHMINWAKRVPGFVDLTLHDQVHLLLECA
WLEILMIGLVWRSMHEHPGKLLFAPNLLDRNQKCVGEMVEIFDMLLATSSRFRMMNLQGEEFVCLKSILLNSGVYTFLL
SSTLKSLEEKDHIHRVLDKITDTLIHLMAGLTLQQHQRLAQLLILSHIRHMSNKGMEHLYSMKCKNVVPLYDILLEML
--X@(#=238/240)
1L2J|A|--SPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESCWME
VLMMLMWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVGILEIFDMLLATSSRFRRELKQHQKEYLCVKAMILLNSMYPLVTATQ
DA-DSSRKLHLLNAVTDALVWVIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPYDILLEMLN
A-@(#=235/240)
1QKM|A|--SPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESCWM
EVLMMGLMWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVGILEIFDMLLATSSRFRRELKQHQKEYLCVKAMILLNSMYPLVTAT
QDA-DSSRKLHLLNAVTDALVWVIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPYDILLEML
NA-@(#=235/240)
1U3Q|A|--SPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESCWM
EVLMMGLMWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVGILEIFDMLLATSSRFRRELKQHQKEYLCVKAMILLNSMYPLVTAT
QDA-DSSRKLHLLNAVTDALVWVIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPYDILLEML
NA-@(#=235/240)
2I0G|A|--SPEQLVLTLLAEPPHVLISRPSAPFTEASMMMSLTKLADKELVHMISWAKKIPGFVELSLFDQVRLLESCWME
VLMMLMWRSIDHPGKLIFAPDLVDRDEGKCVGILEIFDMLLATSSRFRRELKQHQKEYLCVKAMILLNSMYPLVTATQ
DA-DSSRKLHLLNAVTDALVWVIAKSGISSQQSMRLANLLMLLSHVRHASNKGMEHLLNMKCKNVVVPYDILLEMLN
A-@(#=235/240)
```

#### 4.4 フラグメント手動指定（リガンド 4 分割）

自動分割して、リガンド部分(フラグメント番号 200 番)を手動で 4 フラグメントとする。

##### 4.4.1 PDB 読み込み

PDB(HIV-P.pdb)を読み込み、File→Edit ABINIT-MP Input File を選択し、ABINIT-MP Input File 編集画面を表示します。FMOCTRL タブをクリックし、Auto Fragmentation で hybrid を指定。”Set fragmentation”ボタンをクリックします。

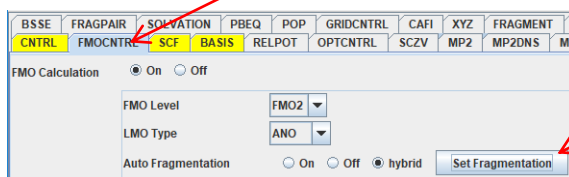


図 4.20 FMOCTRL タブ

##### 4.4.2 フラグメント自動生成

Generate Fragments でフラグメントを自動生成します。リガンドは 200 番になります。フラグメントを自動生成時は、Atom の色は Fragment に設定されます。

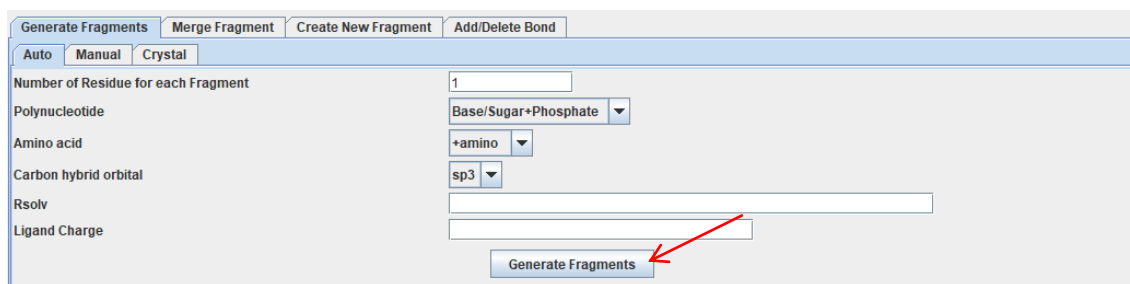


図 4.21 Generate Fragments

##### 4.4.3 リガンド編集の表示設定

リガンド編集のため、Display All Information を NO にして、HybridFrag で編集対象の 200 番を指定して“Apply”ボタンをクリックする。Display All DBA を NO にします。

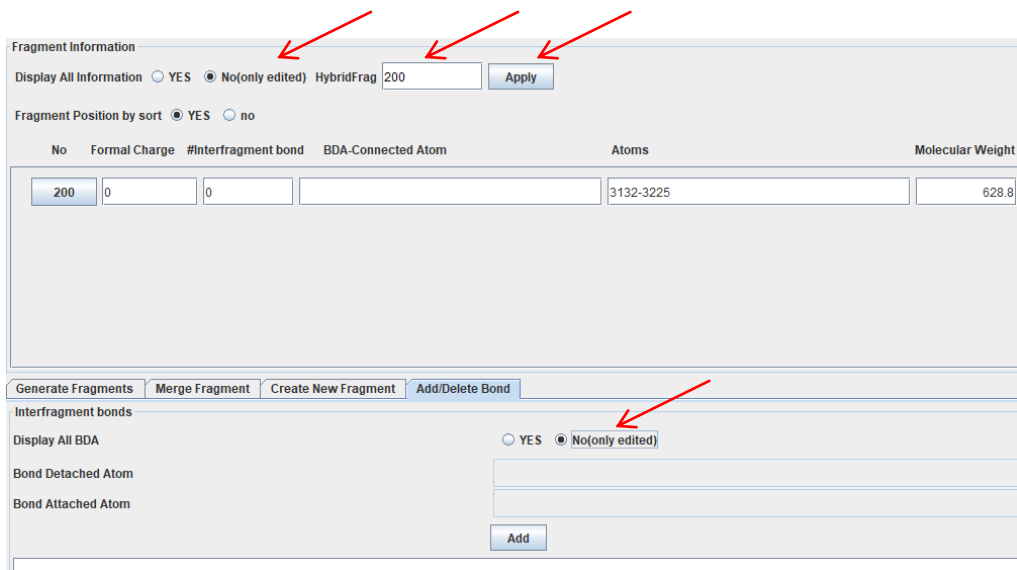


図 4.22 編集対象の表示指定

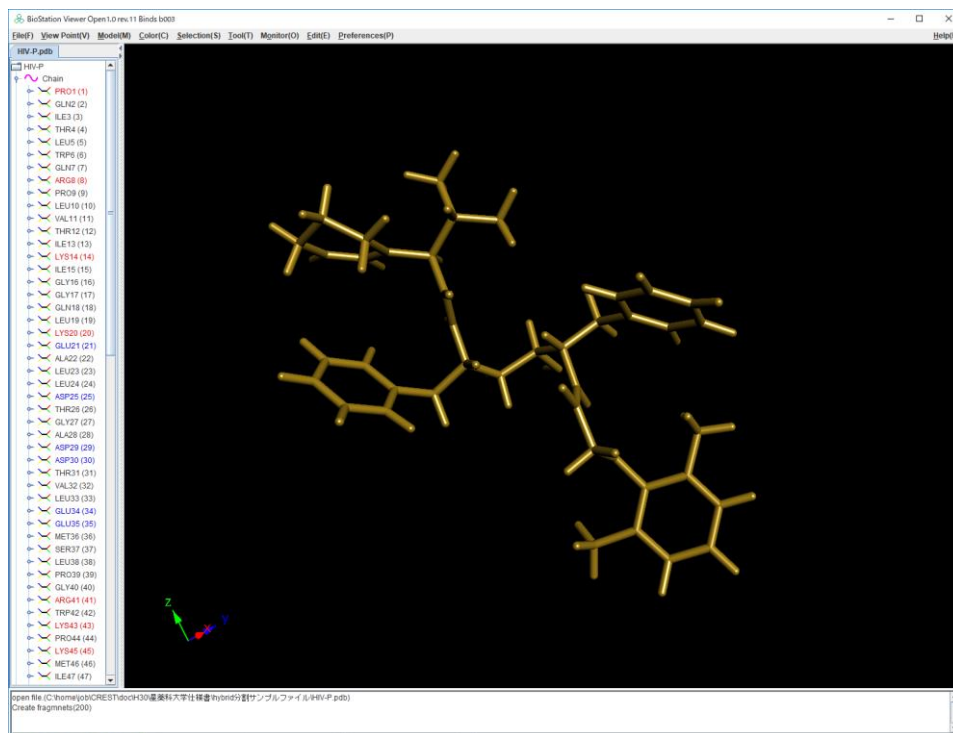


図 4.23 リガンドの表示

#### 4.4.4 新しいフラグメントの設定

リガンド部分のフラグメントを **Create New Fragment** で指定し、分割して指定する3つのフラグメントを設定します。表示で対象原子をクリックするか、番号がわかっているならば、カット&ペーストして、”**Create New Fragment**”ボタンをクリックします。

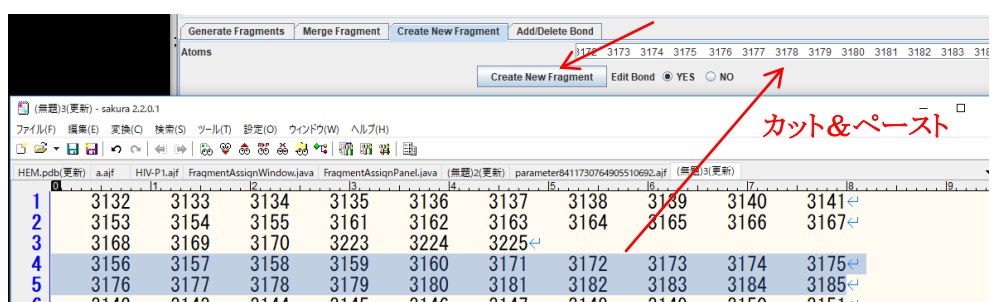
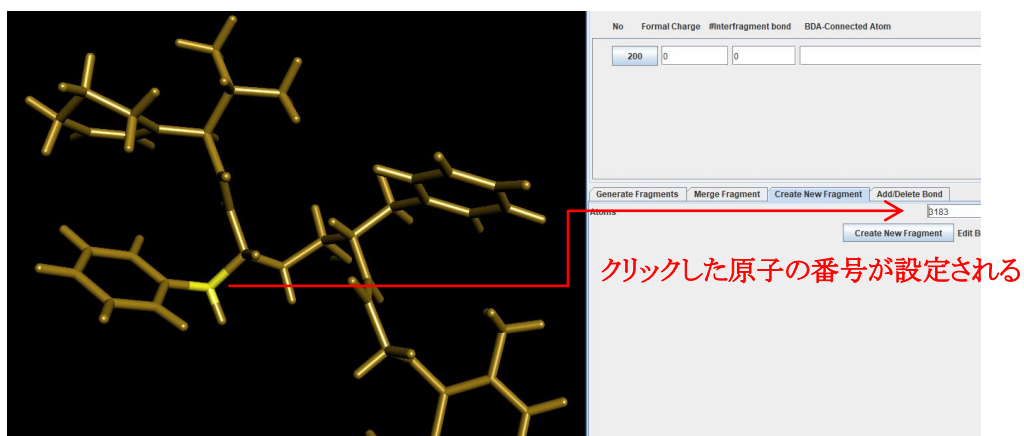


図 4.24 フラグメントの構成原子指定

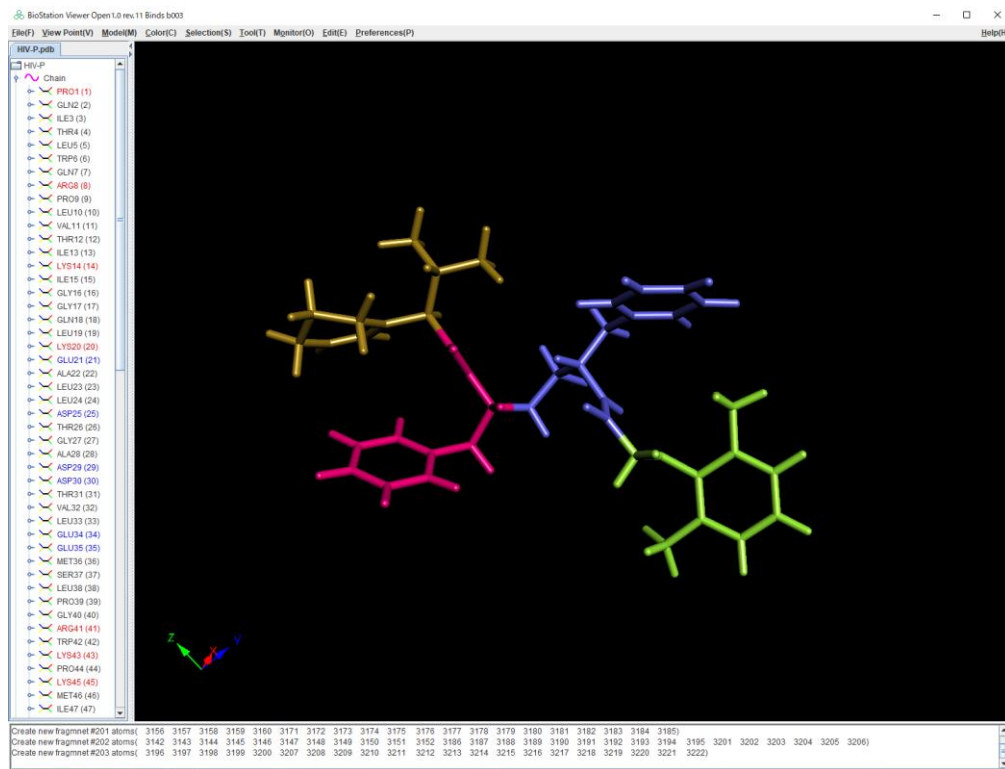


図 4.25 フラグメントの指定後

Fragment Information

Display All Information  YES  No(only edited) HybridFrag 200

Fragment Position by sort  YES  no

No	Formal Charge	#Interfragment bond	BDA-Connected Atom	Atoms	Molecular Weight
* 200	1	0		3132-3141 3153-3155 3161-3170 3223-3225	155.2
* 201	0	1	C(3154)LPV200-C(3156)LPV200:sp3 *	3156-3160 3171-3185	147.2
* 202	0	1	C(3159)LPV200-C(3186)LPV200:sp3 *	3142-3152 3186-3195 3201-3206	191.2
* 203	-1	1	C(3195)LPV200-C(3196)LPV200:sp3 *	3196-3200 3207-3222	135.2

Generate Fragments Merge Fragment Create New Fragment Add/Delete Bond

Interfragment bonds

Display All BDA  YES  No(only edited)

Bond Detached Atom

Bond Attached Atom

図 4.26 フラグメントの指定後（フラグメント情報）

#### 4.4.5 アラインメントデータの編集

##### 1) BDAを3つ設定

原子をクリックして”Add”ボタンをクリックする。

Fragment Information

Display All Information  YES  No(only edited) HybridFrag 200

Fragment Position by sort  YES  no

No	Formal Charge	#Interfragment bond	BDA-Connected Atom	Atoms	Molecular Weight
* 200	0	0		3132-3141	155.2
* 201	0	0		3156-3160	147.2
* 202	0	0		3142-3152	191.2
* 203	0	0		3196-3200	135.2

Generate Fragments Merge Fragment Create New Fragment Add/Delete Bond

Interfragment bonds

Display All BDA  YES  No(only edited)

Bond Detached Atom C(3154)LPV200

Bond Attached Atom C(3156)LPV200

クリックした原子の番号が設定される

図 4.27 BDA 指定

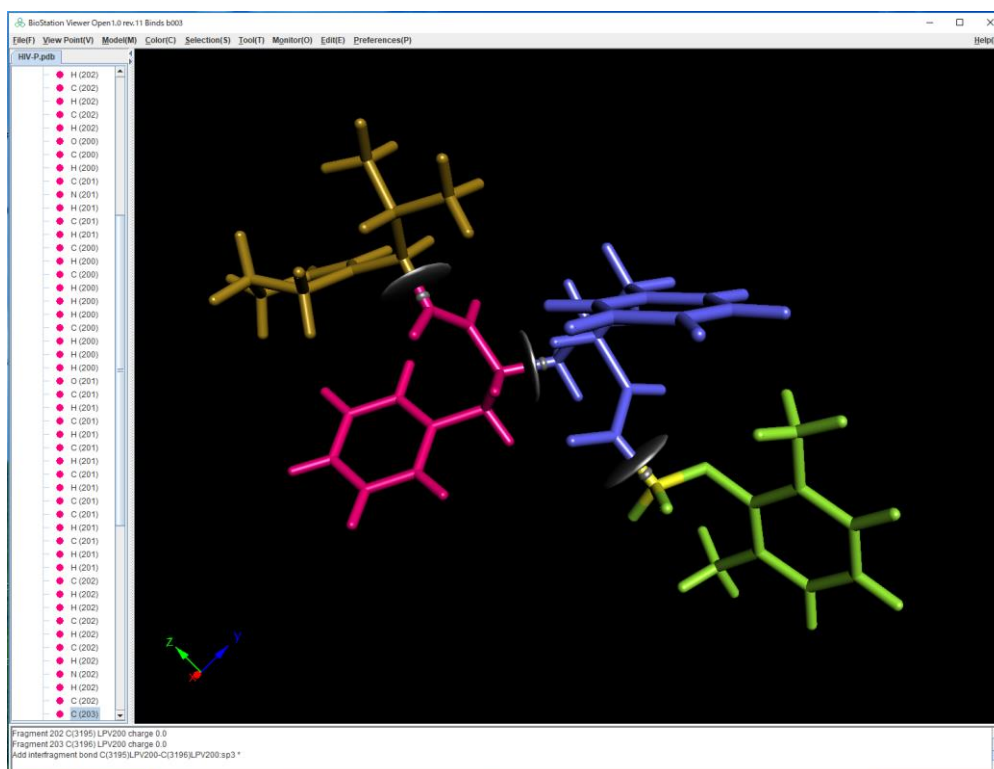
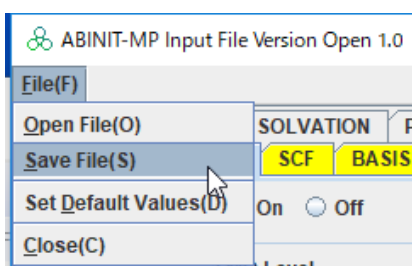


図 4.28 BDA 作成後

図 4.29 BDA 作成後 (BDA 情報)

#### 4.4.6 AJF ファイル出力

File→Save を選択し、出力するファイル名を指定する



出力されたファイル(抜粋)

```

...
&FMOCNTRL
FMO=' ON'
NBody=2
AutoFrag=' HYBRID'
FragSizeResidue=1
FragSizeNucleotide='/base'
FragSizeAminoacid=' +amino'
Frag_Carbon=' sp3'
HybridFrag=' 200'
HybridNF=4
HybridSort=' YES'
...
&FRAGMENT
  26      20      27      21
   1       0       0      -1
   0       1       1       1
 3132  3133  3134  3135  3136  3137  3138  3139  3140  3141
 3153  3154  3155  3161  3162  3163  3164  3165  3166  3167
 3168  3169  3170  3223  3224  3225
 3156  3157  3158  3159  3160  3171  3172  3173  3174  3175
 3176  3177  3178  3179  3180  3181  3182  3183  3184  3185
 3142  3143  3144  3145  3146  3147  3148  3149  3150  3151
 3152  3186  3187  3188  3189  3190  3191  3192  3193  3194
 3195  3201  3202  3203  3204  3205  3206
 3196  3197  3198  3199  3200  3207  3208  3209  3210  3211
 3212  3213  3214  3215  3216  3217  3218  3219  3220  3221
 3222
 3154  3156      3
 3159  3186      3
 3195  3196      3
/

```



#### 4.5 フラグメント手動指定（タンパク質と共有結合しているリガンドのBDA 設定）

この例題の PDB では、タンパク(Cys797)とリガンド(HKI)の間に共有結合があり、自動分割では対応できない構造のため、Viewer で手動により設定することにより、解析に使用可能な AJF ファイルを作成します。

##### 4.5.1 PDB の読み込み

PDB (3W2Q\_wild\_mmff94xOpt-renumberd.pdb) を読み込みます。次に File→Edit ABINIT-MP Input File を選択し、ABINIT-MP Input File 編集画面を表示。FMOCNTRL タブをクリックし Auto Fragmentation で hybrid を指定。”Set fragmentation”ボタンをクリックします。

##### 4.5.2 自動分割実行

この例の PDB をそのまま自動分割すると、リガンド部分の共有分の電荷が現状では評価できず、自動分割でエラーとなるので、フラグメント自動分割のパラメータとして Ligand Charge に HKI=1 を指定することにより自動分割を行います。

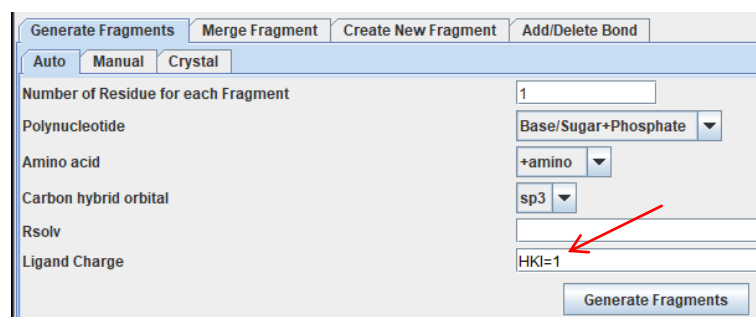


図 4.30 フラグメント自動分割パラメータ指定

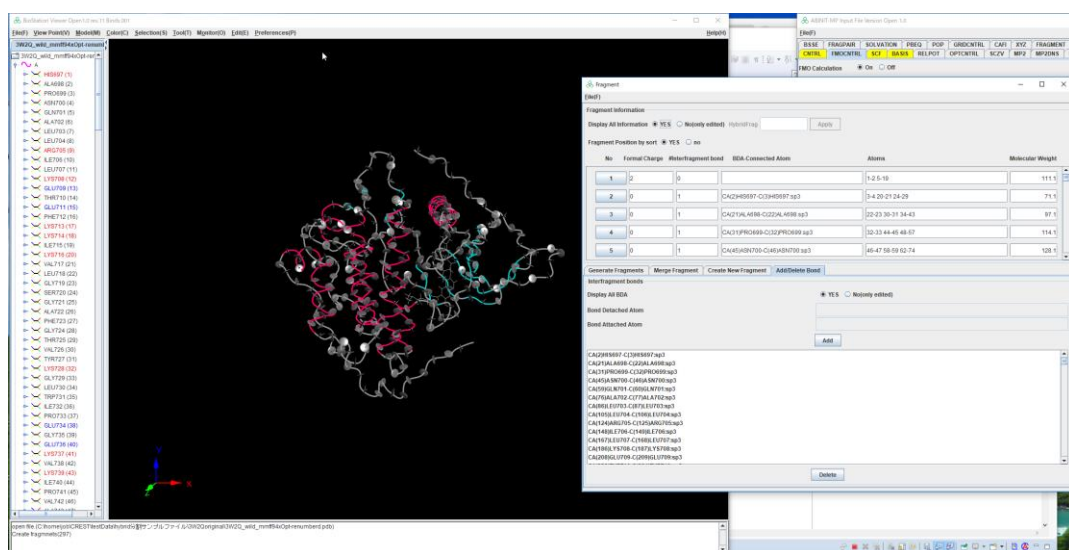


図 4.31 自動分割後

#### 4.5.3 フラグメント番号を確認

Tree 図で編集対象の Cys797 とリガンド(HKI)のフラグメント番号を確認。101,297 です。



#### 4.5.4 対象フラグメントだけを表示

編集しやすいように、対象フラグメントだけを表示します。Display All Information、Display All BDA を No にして、HybridFlag に 101,297 を指定して”Apply”ボタンをクリックします。Cys797 とリガンド(HKI)だけ表示されます。ここで、Formal Charge はそれぞれ -1, 1 ですが BDA の設定により変わってしまうので後でこの値に修正します。

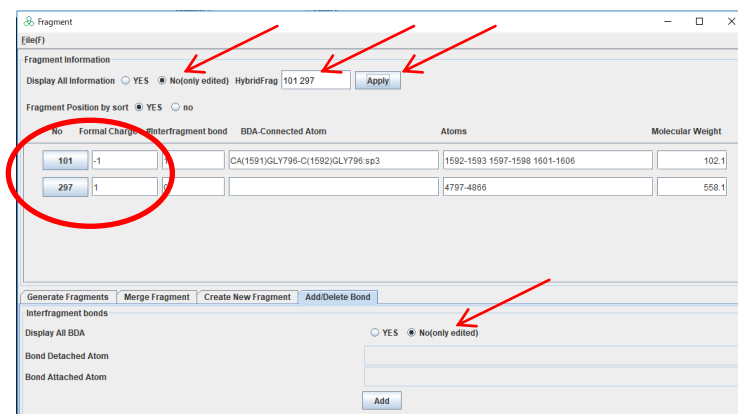


図 4.32 対象フラグメントの表示指定

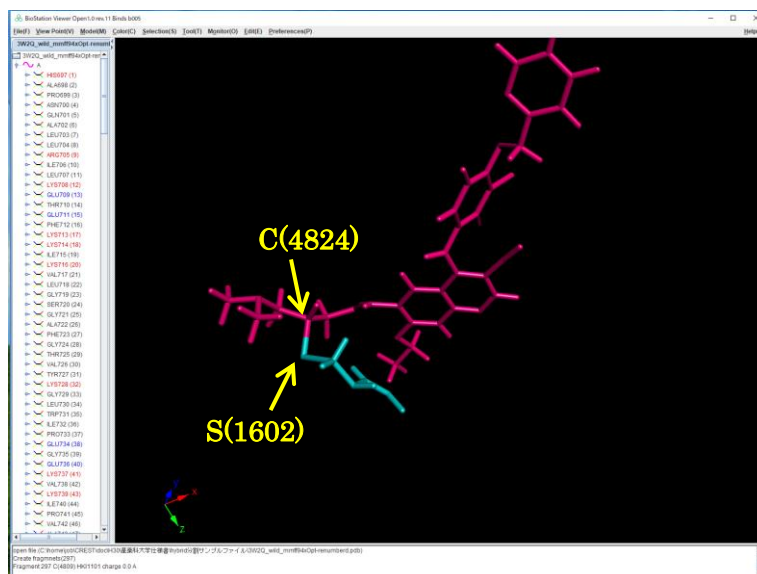


図 4.33 表示指定後

#### 4.5.5 BDA 設定

自動分割では、CYS-リガンド間の BDA が設定されないため、手動で BDA を設定します。設定するリガンドの C(4824)、CYS の SG(1602)を順にクリックして、”Add”ボタンをクリックします。BDA が設定され表示されます。

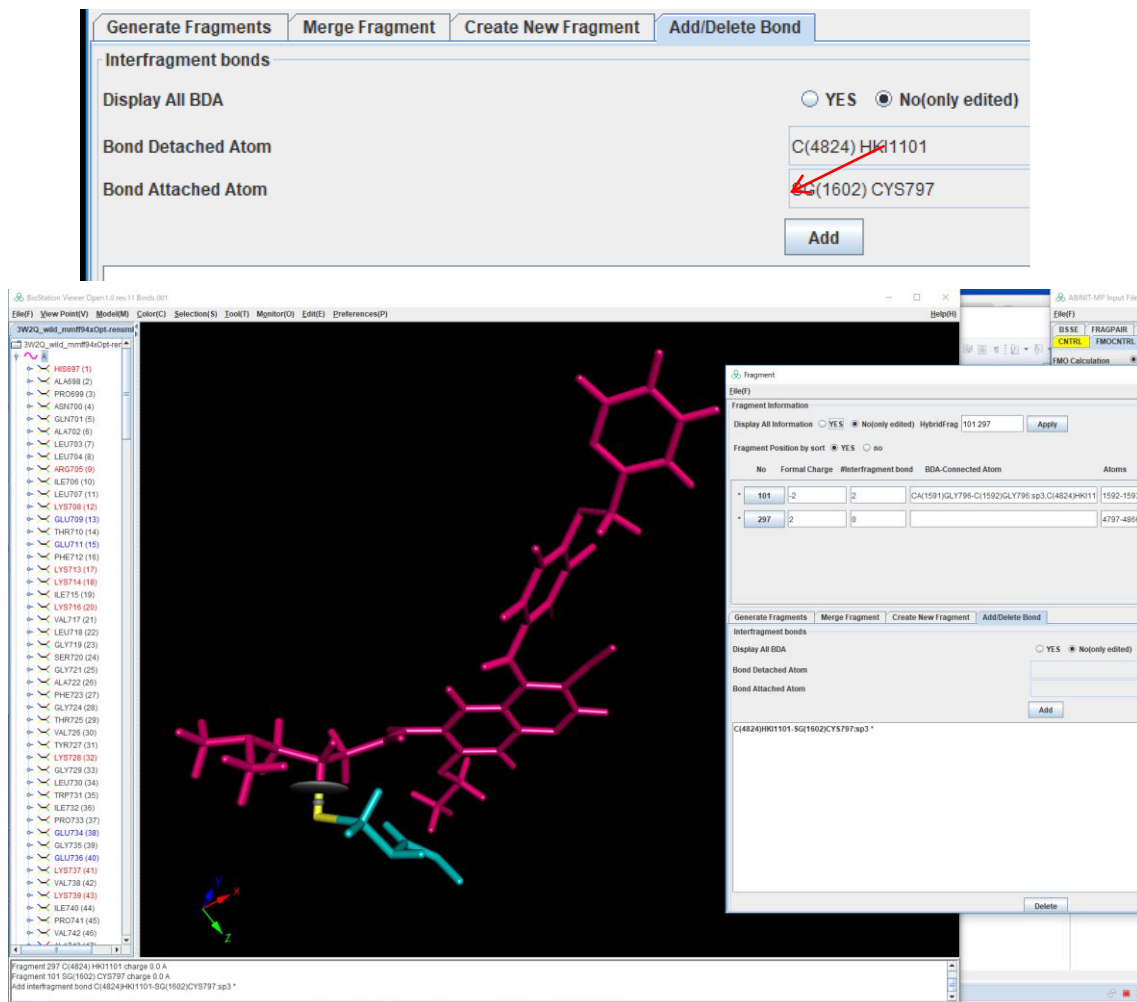
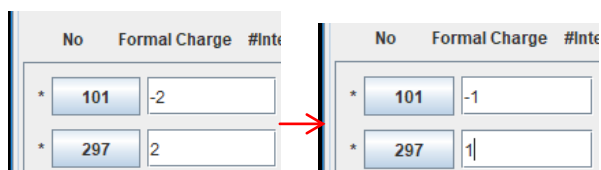


図 4.34 BDA 設定

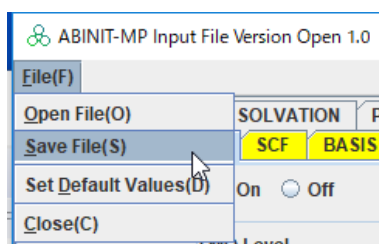
#### 4.5.6 Formal Charge の設定

BDA の設定により Formal Charge が、-2,2 に変わってしまうので、本来の値の-1,1 に修正します。



#### 4.5.7 A.JF ファイル出力

File→Save を選択し、出力するファイル名を指定する



出力されたファイル(抜粋)

```
...
FMO=' ON'
NBody=2
AutoFrag=' HYBRID'
FragSizeResidue=1
FragSizeNucleotide='/base'
FragSizeAminoacid='+amino'
Frag_Carbon=' sp3'
LigandCharge=' HKI=-1'
HybridFrag=' 101, 297'
HybridNF=2
HybridSort=' YES'
...
&FRAGMENT
  10    70
   -1    1
    2    0
 1592  1593  1597  1598  1601  1602  1603  1604  1605  1606
 4797  4798  4799  4800  4801  4802  4803  4804  4805  4806
 4807  4808  4809  4810  4811  4812  4813  4814  4815  4816
 4817  4818  4819  4820  4821  4822  4823  4824  4825  4826
 4827  4828  4829  4830  4831  4832  4833  4834  4835  4836
 4837  4838  4839  4840  4841  4842  4843  4844  4845  4846
 4847  4848  4849  4850  4851  4852  4853  4854  4855  4856
 4857  4858  4859  4860  4861  4862  4863  4864  4865  4866
 1591  1592      3
 4824  1602      3
/
```

## 5 超分子計算

超分子計算の結果を表示する場合の計算式を示します。

FMO 法による超分子計算(複合体のフラグメント分割がタンパク質、リガンドのフラグメント分割の単純な和になっている場合 C: 複合体, P:タンパク質, L:リガンド, C = P U L)は、複合体の全エネルギーを  $E^C$ 、タンパク質の全エネルギーを  $E^P$ 、リガンド分子の全エネルギーを  $E^L$  とすると、超分子計算によるタンパク質とリガンド間の結合作用エネルギー  $\Delta E$  は

$$\Delta E = E^C - (E^P + E^L) \quad (\text{式 5.1})$$

となります。 $E^C, E^P, E^L$  を FMO2 法で計算したとすると、

$$\begin{aligned} \Delta E &= E^C - (E^P + E^L) \\ &= \sum_{\substack{I \\ I \in C}} E'_I{}^C + \sum_{\substack{I > J \\ I, J \in C}} \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^C - \left( \sum_{\substack{I \\ I \in P}} E'_I{}^P + \sum_{\substack{I > J \\ I, J \in P}} \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^P + \sum_{\substack{I \\ I \in L}} E'_I{}^L + \sum_{\substack{I > J \\ I, J \in L}} \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^L \right) \end{aligned} \quad (\text{式 5.2})$$

となります。 $E'$  は、環境静電ポテンシャルからの寄与を除いたモノマーのエネルギー、 $\Delta \tilde{E}_{IJ}$  はフラグメント間相互作用エネルギー(IFIE)の値を示す)  $E^C$  をタンパク質内、リガンド内、タンパク質—リガンド分子間の項に分解すると

$$E^C = \sum_{\substack{I \\ I \in P}} E'_I{}^C + \sum_{\substack{I > J \\ I, J \in P}} \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^C + \sum_{\substack{I \\ I \in L}} E'_I{}^C + \sum_{\substack{I > J \\ I, J \in L}} \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^C + \sum_{\substack{I \\ I \in P}} \sum_{\substack{J \\ J \in L}} \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^C \quad (\text{式 5.3})$$

となります。ここで、タンパク質、リガンド分子について項をまとめ

$$\begin{aligned} \Delta E'_I &= E'_I{}^C - E'_I{}^P \quad I \in P \\ &= E'_I{}^C - E'_I{}^L \quad I \in L \end{aligned} \quad (\text{式 5.4})$$

$$\begin{aligned} \Delta \Delta \tilde{E}_{IJ} &= \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^C - \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^P \quad I, J \in P \\ &= \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^C - \Delta \tilde{E}_{IJ}{}^L \quad I, J \in L \end{aligned} \quad (\text{式 5.5})$$

を定義すると、 $\Delta E$  を

$$\Delta E = \left( \sum_{I \in P} \Delta E'_I + \sum_{\substack{I > J \\ I, J \in P}} \Delta \Delta \tilde{E}_{IJ} \right) + \left( \sum_{I \in L} \Delta E'_I + \sum_{\substack{I > J \\ I, J \in L}} \Delta \Delta \tilde{E}_{IJ} \right) + \sum_{I \in P} \sum_{J \in L} \Delta \tilde{E}_{IJ}^C \quad (\text{式 5.6})$$

と表すことができます。ここで、第1項はタンパク質とリガンド分子の結合によるタンパク質の電子緩和による安定化エネルギー、第2項はリガンド分子の電子緩和による安定化エネルギー、第3項はタンパク質—リガンド分子間の IFIE と解釈できます。

Viewer では、複合体、タンパク質、リガンドそれぞれの計算結果チェックポイントファイルを読み込み、対応するフラグメント番号を指定して、上記の計算を行います。

チェックポイントファイルに記述されている IFIE、モノマー計算結果からの具体的な計算方法を次に示します。

### 1) ステップ1 $\Delta E'_I$ の計算

複合体から、タンパク質、リガンドそれぞれモノマー部分の値の差を計算します。

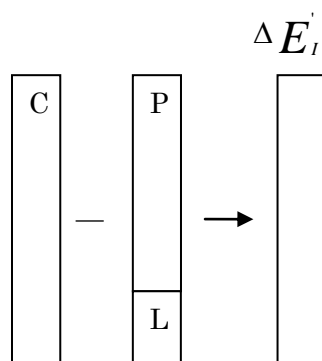


図 5.1  $\Delta E'_{IJ}$  の計算のメモリーイメージ

### 2) ステップ2 $\Delta \Delta \tilde{E}_{IJ}$ の計算

複合体から、タンパク質、リガンドそれぞれ IFIE の値の差を計算します。

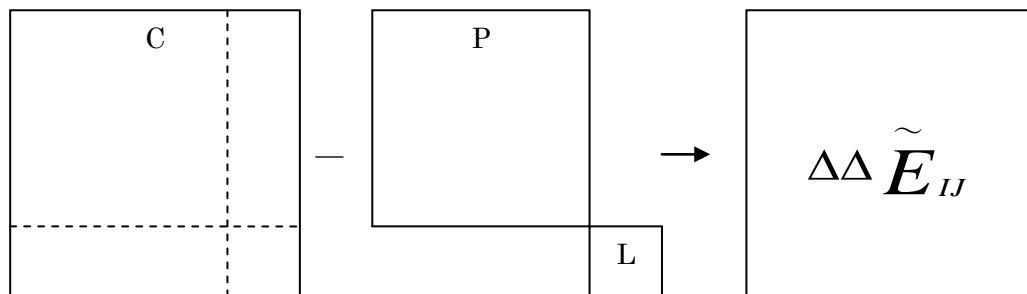


図 5.2  $\Delta \Delta \tilde{E}_{IJ}$  の計算のメモリーイメージ

3) ステップ 3 Supermolecule IFIE  $\Delta\tilde{E}_{IJ}^{C'}$  の計算

ステップ1, 2の結果を使用して計算します。

$$\text{タンパク質} : \Delta E_I'' = \Delta E_I' + \frac{1}{2} \sum_{\substack{K \neq I \\ K \in P}} \Delta\Delta\tilde{E}_{IK} \quad (\text{式 5.7})$$

$$\text{リガンド} : \Delta E_J'' = \Delta E_J' + \frac{1}{2} \sum_{\substack{K \neq J \\ K \in L}} \Delta\Delta\tilde{E}_{JK} \quad (\text{式 5.8})$$

$$\Delta\tilde{E}_{IJ}^{C'} = \Delta\tilde{E}_{IJ}^C + \Delta E_I'' / J + \Delta E_J'' / I \quad (\text{式 5.9})$$

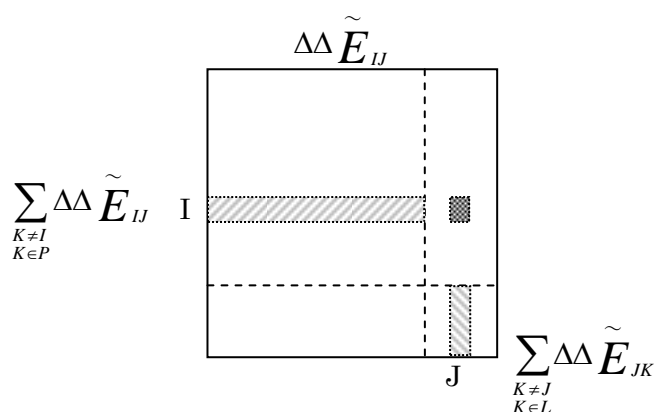


図 5.3  $\sum \Delta\Delta\tilde{E}_{IJ}$  の計算のメモリエイメージ

(式 5.7)の右辺第2項では、電子緩和によるタンパク質内部の IFIE 変化分をそれぞれ 1/2 にして各フラグメントに帰属します。(式 5.8)のリガンドについても同様です。得られる supermolecule IFIE では、リガンド結合による電子緩和の効果を取り込んだ、フラグメント単位のタンパク質-リガンド IFIE 解析が可能になります。

## 6 構造最適化のオプション

構造最適化は、Viewer より別プログラムを呼び出すことにより実行しています。ここで、指定可能なオプションを以下に示します。このオプションを記述したファイルを用意し、構造最適化の画面で指定します。

タンパク質の水素付加 (任意)	<p><b>-B</b> Atom type の計算を指定。</p> <p><b>-n</b> 水素原子の付加(-B 指定時に有効)。 水素を付加する場合:無記入 水素を付加しない場合:-n</p>						
構造最適化の指定 (任意)	<p><b>-O</b> XUFF 力場による構造最適化の実行。 構造最適化計算を行う場合:-O 構造最適化計算を行わない場合:無記入</p> <p><b>-X #</b> MQEq 法による電荷再計算の最適化計算ループ間隔(-O 指定時に有効)を正の整数#で指定する。</p> <p><b>-h</b> 水素原子位置の最適化(-O 指定時に有効)。全ての水素原子に対して、下記で示す <b>ACTIVE</b> が指定されたとして処理し、水素原子以外の全ての原子に対して、下記で示す <b>INACTIVE</b> が指定されたとして処理する。</p> <p><b>-S</b> 主鎖の重原子位置を固定。側鎖構造と水素原子位置の最適化(-O 指定時に有効)。主鎖の重原子を除く全ての原子に対して、下記で示す <b>ACTIVE</b> が指定されたとして処理し、主鎖の全ての重原子に対して、下記で示す <b>INACTIVE</b> が指定されたとして処理する。</p> <p>PDB 形式と MOL2 形式での主鎖の認識方法は以下の通り。</p> <p>PDB 形式の主鎖:</p> <table border="1" data-bbox="684 1626 951 1861"> <thead> <tr> <th>Atom name</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>N</td> </tr> <tr> <td>CA</td> </tr> <tr> <td>C</td> </tr> <tr> <td>O</td> </tr> <tr> <td>OXT</td> </tr> </tbody> </table>	Atom name	N	CA	C	O	OXT
Atom name							
N							
CA							
C							
O							
OXT							



MOL2 形式の主鎖:

Atom name	Atom type
N	N.4 或いは N.am
CA	C.3
C	C.2
O	O.2
OXT	O.3

(両方を満たすもの)

-T

N 末端、C 末端の処理。

N 末端、C 末端を解離させるとき: -T  
(NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, COO<sup>-</sup>)

N 末端、C 末端を解離させないとき: 無記入  
(NH<sub>3</sub>, COOH)

-R

ASP, GLU, LYS, ARG の処理。

荷電状態を指定するとき: -R  
中性状態を指定するとき: 無記入

-H #

ヒスチジンのイミダゾール環の処理 (デフォルトは  $\pi$  型)。

$\pi$  型 (d 型): -H d

$\tau$  型 (e 型): -H e

p 型 (p 型): -H p

-C # c

分子毎に全電荷を指定。

#: 分子の番号

c: charge

デフォルトは各分子の全電荷ゼロ。

PDB 形式と MOL2 形式での分子の区別方法は以下の通り。

PDB 形式の分子の区別: (一部未対応)

TER、HETATM、分子名 (残基名)、残基番号の順に確認する。以下の場合、分子を変更する。

- TER が現れたら。
- HETATM が現れたら。
- HETATM 内の分子名が変わったら (5 原子程度以下の分子を除く、水分子を除く)。
- HETATM から ATOM に変わったら。
- 残基番号が小さくなったら。

MOL2 形式の主鎖の区別:

以下の Substruct id と Substruct name の情報を利用して区別する。

Substruct id: アミノ酸残基や低分子化合物単位に与えられている整数。昇順にカウントされる。

Substruct name: アミノ酸残基や化合物の名称。異なる低分子化合物が連続で指定されていると、Substruct id が変化しない場合でも、この Substruct name が変化する。

-k [Tinker\_key\_file]

[Tinker\_key\_file]: Tinker 形式の Keyword Control ファイルを指定 (-O 指定時に有効)。

デフォルト名は tinker.key。

各原子が ACTIVE か INACTIVE かを指定できる。

例) ACTIVE 4 -9 17 23

は、原子 4, 9-17, 23 を計算時にアクティブにする。マイナス(-) は範囲のスタートを意味する。ACTIVE は複数指定可能。

INACTIVE はアクティブの逆の意味で、やはり複数指定できる。但し、同じ原子が ACTIVE と INACTIVE の両方を指定された場合 ACTIVE が優先することと、ACTIVE と INACTIVE のどちらの指定にも該当しない原子はアクティブになることの 2 点で、ACTIVE と INACTIVE の利用方法が異なる。

-f [xuffopt\_parameter\_file]

[xuffopt\_parameter\_file]: xuffopt 独自形式のパラメータファイルを指定。-f 以外のオプションと以下のアミノ酸残基に関する計条件 ACTIVE\_RESIDUE, INACTIVE\_RESIDUE, ACTIVE\_SIDECHAIN の指定と、最適化ループの収束計算に関する条件 SDLOOP, CGLOOP, MAXLOOP, SDGRADIENT, CGGRADIENT, REENERGY, RGRADIENT が指定できる。

デフォルト名は xuffopt.par。

各アミノ酸残基が ACTIVE\_RESIDUE か INACTIVE\_RESIDUE かを指定できる。指定方法は ACTIVE, INACTIVE と同じ。

例) ACTIVE\_RESIDUE 4 -9 17 23

は、残基 4, 9-17, 23 を計算時にアクティブにする。マイナス(-) は範囲のスタートを意味する。ACTIVE\_RESIDUE は複数指定可能。

INACTIVE\_RESIDUE はアクティブの逆の意味で、やはり複数指定できる。但し、同じ残基が ACTIVE\_RESIDUE と INACTIVE\_RESIDUE の両方を指定された場合 ACTIVE\_RESIDUE が優先することと、ACTIVE\_RESIDUE と INACTIVE\_RESIDUE のどちらの指定にも該当しない残基はアクティブになることの 2 点で、ACTIVE\_RESIDUE と INACTIVE\_RESIDUE の利用方法が異なる。

各アミノ酸残基の側鎖(主鎖を除いた部分)に対して ACTIVE\_SIDECHAIN を指定できる。指定方法は ACTIVE, ACTIVE\_RESIDUE と同じ。

最適化ループの収束計算回数と収束判定条件を指定できる(以下の例はデフォルト値)。

```
例) SDLOOP 100
    CGLOOP 400
    MAXLOOP 500
    SDGRADIENT 1000.0
    CGGRADIENT 0.1
    RGRADIENT 0.1
    RENERGY 0.0001
```

SDLOOP: 最大 Steepest Descent 法ループ数(SD ループ)

CGLOOP: 最大 Conjugate Gradient 法ループ数(CG ループ)

LOOPMAX: 最大ループ数

SDGRADIENT: SD ループの gradient 打ち切り値

CGGRADIENT: CG ループの gradient 打ち切り値

RGRADIENT: Gradient の収束判定値

RENERGY: 全エネルギーの残差(kcal/mol)の収束判定値

Gradient は 2 乗和ルートの値で判定。単位は(kcal/mol $\cdot$ Å)。SD ループが途中で打ち切られた場合、CG ループは「最大 SD ループ数+最大 CG ループ数」まで続く。

なお、現在 BFGC 法の計算を行っていないので、CGLOOP と CGGRADIENT は無効になっている。

## 7 インストール

### 7.1 配布形式

配布形式は、Windows のインストーラです。

### 7.2 システムのインストール

インストーラをダブルクリックするとインストールします。デスクトップにショートカットが作成されます。

スタート→ABINIT-MP Open Consortium→BioStationViewer

を選択すると起動します。起動時のカレントフォルダーは、インストールディレクトリになっています。

変更するには、メニューの BioStationViewer 上で右ボタンをクリックして、プロパティーを選択し、作業フォルダーを変更してください。この場合、インストールディレクトリを Path に加える必要がある

ので、  
C:¥Program Files¥ABINIT-MP Open Consortium¥BioStationViewer  
を加えてください。

### 7.3 動作環境

動作環境を表 7.1 に示します。

3D 表示を快適に行うには、VRAM 128M 以上のグラフィックカードをご利用ください。解像度は SXGA(1280x1024)以上をご使用ください。

表 7.1 動作環境

項目	要件
OS	Windows(2000/XP,7,10)
CPU	Pentium II 400MHz 以上
メモリ	メモリ 2GB 以上を推奨

### 7.4 ファイルの取得

ABINIT-MP のホームページから関連ファイルをダウンロードして取得してください。以下のファイルが必要なファイルです。

ファイル名	説明
BioStationViewerOpen_1.0_rev11.exe	BioStation インストーラファイル
sampleData.zip	サンプルファイル
tutorial.zip	チュートリアルデータ

## 7.5 Reduce の設定

水素付加機能で Reduce を使用します。Reduce は

<http://kinemage.biochem.duke.edu/software/reduce.php>

よりダウンロード可能なフリーのプログラムです。

プログラムをダウンロードして適当な場所へ保存し、そのフォルダーへPathを設定して下さい。

Path の設定方法は前節を参照してください。オプションを以下に示します。

reduce: version 2.15 10/4/01, Copyright 1997-2001, J. Michael Word

arguments: [-flags] filename or -

Adds hydrogens to a PDB format file and writes to standard output.

(note: By default, HIS sidechain NH protons are not added. See -BUILD)

Flags:

- Trim                   remove (rather than add) hydrogens
  
- NOOH                   remove hydrogens on OH and SH groups
- OH                     add hydrogens on OH and SH groups (default)
  
- HIS                    create NH hydrogens on HIS rings
- FLIPs                  allow complete ASN, GLN and HIS sidechains to flip  
                          (usually used with -HIS)
- NOHETH                do not attempt to add NH proton on Het groups
- ROTNH3                allow lysine NH3 to rotate (default)
- NOROTNH3             do not allow lysine NH3 to rotate
- ROTEXist              allow existing rotatable groups (OH, SH, Met-CH3) to rotate
- ROTEXOH               allow existing OH & SH groups to rotate
- ALLMethyls            allow all methyl groups to rotate
- ONLYA                 only adjust 'A' conformations (default)
- ALLALT                process adjustments for all conformations
- NOROTMET             do not rotate methionine methyl groups
- NOADJust              do not process any rot or flip adjustments
  
- BUILD                 add H, including His sc NH, then rotate and flip groups  
                          (except for pre-existing methionine methyl hydrogens)  
                          (same as: -OH -ROTEXOH -HIS -FLIP)

-Keep keep bond lengths as found  
 -NBonds# remove dots if cause within n bonds (default=3)  
 -Model# which model to process (default=1)  
 -Nterm# max number of nterm residue (default=1)  
 -DENSity#.# dot density (in dots/A<sup>2</sup>) for VDW calculations (default=16)  
 -RADIus#.# probe radius (in A) for VDW calculations (default=0)  
 -OCCcuttoff#.# occupancy cutoff for adjustments (default=0.01)  
 -H2OBcuttoff#.# B-factor cutoff for water atoms (default=40)  
 -H2OOCcuttoff#.# occupancy cutoff for water atoms (default=0.66)  
 -PENalty#.# fraction of std. bias towards original orientation (default=1)  
 -HBREGcuttoff#.# over this gap regular HBonds bump (default=0.6)  
 -HBCHargedcut#.# over this gap charged HBonds bump (default=0.4)  
 -BADBumpcut#.# at this gap a bump is 'bad' (default=0.4)  
 -SEGIDmap "seg,c..." assign chainID based on segment identifier field  
 -Xplor use Xplor conventions for naming polar hydrogens  
 -NOCon drop conect records  
 -LIMIT# max num iter. for exhaustive search (default=100000)  
 -NOTICKs do not display the set orientation ticker during processing  
 -SHOWSCore display scores for each orientation considered during processing  
 -FIX "filename" if given, file specifies orientations for adjustable groups  
 -DB "filename" file to search for het info  
 (default="/usr/local/reduce\_het\_dict.txt")

note: can also redirect with unix environment variable: REDUCE\_HET\_DICT

-Quiet do not write extra info to the console  
 -REFeRence display citation reference  
 -Help more extensive description of command line arguments

## 7.6 Babel の設定

環境変数 BABEL\_DIR に

C:\¥Program Files¥ABINIT-MP Open Consortium ¥ BioStationViewer¥babel-lis  
 を設定する。

## 7.7 Bond Builder の使用方法

水素付加プログラム `bond_builder` の使用方法を表 7.2 に示す。

表 7.2 `bond_builder` の使用方法

コマンドライン	<code>% bond_builder.exe -i [input_file_name] [input_file_type]</code> <code>-o [output_file_name] [output_file_type]</code> <code>-B -n -T -R -H #</code>
入力ファイルの指定	<code>-i [input_file_name] [input_file_type]</code> [input_file_name]: 入力ファイル名 (必須)。 [input_file_type]: 入力ファイルの形式 (任意)。 PDB 形式の場合: <code>pdb, ent</code> MOL2 形式の場合: <code>mol2</code> デフォルトは、入力ファイル名 <code>input_file_name</code> の拡張子が <code>pdb</code> か <code>ent</code> の場合 PDB 形式、 <code>mol2</code> の場合 MOL2 形式。
出力ファイルの指定	<code>-o [output_file_name] [output_file_type]</code> [output_file_name]: 出力ファイル名。 [output_file_type]: 出力ファイルの形式 (任意)。 PDB 形式の場合: <code>pdb, ent</code> MOL2 形式の場合: <code>mol2</code> デフォルトは、入力ファイル名 <code>output_file_name</code> の拡張子が <code>pdb</code> か <code>ent</code> の場合 PDB 形式、 <code>mol2</code> の場合 MOL2 形式。 <code>-o</code> の指定がないと、入力ファイルに <code>_builder</code> を付加したファイル名で出力する。例) <code>input_builder.mol2</code> このとき、 <code>-B (Atom type の計算を指定)</code> が指定されている場合、入力ファイルに <code>_H</code> を付加したファイル名で出力する。例) <code>input_H.pdb</code>
水素付加 (任意)	<code>-B</code> Atom type の計算を指定。 <code>-n</code> 水素原子の付加 ( <code>-B</code> 指定時に有効)。 水素を付加する場合: 無記入 水素を付加しない場合: <code>-n</code>
N 末端、C 末端の処理 (任意)	<code>-T</code> N 末端、C 末端を解離させるとき: <code>-T</code> ( <code>NH3+</code> , <code>COO-</code> ) N 末端、C 末端を解離させないとき: 無記入 ( <code>NH2</code> , <code>COOH</code> )
荷電アミノ酸残基 <code>ASP, GLU, LYS, ARG</code> の処理 (任意)	<code>-R</code> 荷電状態を指定するとき: <code>-R</code> 中性状態を指定するとき: 無記入
ヒスチジンのイミダゾール環の処理 (デフォルトは $\pi$ 型)	<code>-H #</code> $\pi$ 型 (d 型): <code>-H d</code> $\tau$ 型 (e 型): <code>-H e</code> p 型 (p 型): <code>-H p</code>

## 7.8 TINKER の設定

<http://dasher.wustl.edu/tinker/> よりダウンロードし、インストールフォルダ/binをPathに設定する。インストールフォルダ/jre/bin/client/jvm.dll を bin へコピーする。jvm.dll をコピーしておかないと実行時にエラーとなる。



## 8 謝辞

BioStationViewer の開発は以下のプロジェクトの成果を参考にして開発しました。

- 情報処理振興事業協会(IPA)  
平成 12 年度先端的情報化推進基盤整備事業  
「バイオ産業の基盤整備のためのタンパク質機能予測システムの開発」  
平成 13 年度未踏ソフトウェア創造事業  
「フラグメント分割法に基づいた並列分子計算プログラムの開発」
- 科学技術振興事業団  
計算科学技術活用型特定研究開発推進事業  
「DNAのナノ領域ダイナミクスの第一原理的解析」

文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」「タンパク質・化学物質相互作用解析」の Version6 の成果を使用しています。

科学技術振興機構 CREST 「フラグメント分子軌道法による生体分子計算システムの開発」の支援を受け開発しています。(2004/10-2010/3)

文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発 「革新的シミュレーションソフトウェアの開発」の支援を受け開発しています。(2007/7-2007/9)

文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発 「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」の支援を受け開発しています。(2008/12-2009/3)

科研費・新学術領域研究(研究領域提案型)「水を通して見る生体分子夾雑系の情報熱力学」(課題番号:17H06353)の支援を受けました。

国立医療研究開発機構(AMED) 創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム事業(BINDS) 「構造インフォと FMO 計算を融合したインシリコスクリーニング」(課題番号 18am0101113j0002)の支援を受け開発しています。(2018/12-)

科学技術振興機構 さきがけ「量子構造生物学におけるプロトン:相乗的効果と構造」(グラントナンバー: JPMJPR18GD)の支援を受け開発しています。(2018/9-)

MOLDA は、広島大学 吉田弘先生が開発されたシステムです。残念ながら吉田先生は 2005 年にご逝去されました。生前上記の CREST のメンバーとして参加され、BioStationViewer での利用を許可していただきました。

計算時に固有値を求める必要があり、この部分は **JAMA:Java Matrix Package** (<http://math.nist.gov/javanumerics/jama/>)を使用している。JAMA は、フリーで公開されています。

下記の方々よりご意見、ご助言をいただき感謝の意を表します。

神戸大学 田中成典、栗崎以久男

立教大学 望月祐志

鹿児島大学 石川岳志

株式会社モルシス 甘利真司

広島大学 吉田弘(故人)

アドバンスソフト株式会社 小川哲司、小林将人

産業技術総合研究所 古明地勇人 北浦和夫

微生物化学研究会 梅沢 洋二

CHPI 研究所 西尾 元宏

星薬科大学 福澤薫

国立医薬品食品衛生研究所 中野達也、沖山佳生

国立研究開発法人理化学研究所 渡邊千鶴

みずほ情報総研株式会社 加藤幸一郎、塚本貴志、谷村直樹

スコーピオンテック合同会社 加藤昭史

**FMO 創薬コンソーシアムの皆様**

(敬称略順不同 所属は開発当時のものも含む)

## 9 参考文献

### FMO 基礎

1. K. Kitaura, T. Sawai, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayasi *Chem Phys Lett* **312**, 319-324 (1999).
2. K. Kitaura, E. Ikeo, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayasi *Chem Phys Lett* **313**, 701-706 (1999).
3. T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, Y. Akiyama, M. Uebayasi, K. Kitaura *Chem Phys Lett* **318**, 614-618 (2000).
4. T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, K. Fukuzawa, Y. Akiyama, M. Uebayasi and K. Kitaura *Chem. Phys. Lett.*, **351**, 475-480 (2002).
5. edited by D. G. Fedorov and K. Kitaura “The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems” Taylor & Francis/ CRC Press, Boca Raton, FL, (2009)

### FMO 構造最適化(微分)

6. K. Kitaura, S. Sugiki, T. Nakano, Y. Komeiji, M. Uebayasi *Chem Phys Lett* **336**, 163-170 (2001).

### FMO-MD

7. Y. Komeiji, T. Nakano, K. Fukuzawa, Y. Ueno, Y. Inadomi, T. Nemoto, M. Uebayasi, D. G. Fedorov and K. Kitaura “Fragment Molecular Orbital Method: Application to Molecular Dynamics Simulation, ‘*ab initio* FMO-MD’” *Chem. Phys. Lett.*, **372**, 342-347 (2003).
8. Y. Mochizuki, Y. Komeiji, T. Ishikawa, T. Nakano, H. Yamataka “A fully quantum mechanical simulation study on the lowest  $n-\pi^*$  state of hydrated formaldehyde” *Chem. Phys. Lett.*, **437**, 66-72 (2007).

### FMO-MP2

9. Y. Mochizuki, T. Nakano, S. Koikegami, S. Tanimori, Y. Abe, U. Nagashima, K. Kitaura, *Theor. Chem. Acc.* **112**, 442-452 (2004).
10. Y. Mochizuki, S. Koikegami, T. Nakano, S. Amari, K. Kitaura *Chem. Phys. Lett.* **396**, 473-479 (2004).

### LMP2

11. T. Ishikawa et. al., submitted.

## CIS

12. Y. Mochizuki, S. Koikegami, S. Amari, K. Segawa, K. Kitaura, T. Nakano *Chem Phys Lett.*, **406**, 283–288 (2005).

## CIS(D)

13. Y. Mochizuki, S. Koikegami, S. Amari, K. Segawa, K. Kitaura, T. Nakano *Chem Phys Lett.* 2005, **406**, 283–288 (2005).
14. Y. Mochizuki, K. Tanaka, K. Yamashita, T. Ishikawa, T. Nakano, S. Amari, K. Segawa, T. Murase, H. Tokiwa, M. Sakurai *Theor. Chem. Acc.* in press

## CAFI

15. Mochizuki, Y. *Chem. Phys. Lett.* 2005, **410**, 165–171.
16. Y. Mochizuki, K. Fukuzawa, A. Kato, S. Tanaka, K. Kitaura and T. Nakano, *Chem. Phys. Lett.*, **410**, 247–253 (2005).

## MCP

17. T. Ishikawa, Y. Mochizuki, T. Nakano, S. Amari, H. Mori, H. Honda, T. Fujita, H. Tokiwa, S. Tanaka, Y. Komeiji, K. Fukuzawa, K. Tanaka, E. Miyoshi *Chem. Phys Lett.*, **427**, 159-165 (2006).

## 物性

18. Y. Mochizuki, T. Ishikawa, K. Tanaka, H. Tokiwa, T. Nakano and S. Tanaka “Dynamic polarizability calculation with fragment molecular orbital scheme” *Chemical Physics Lett.* **418**, 418-422 (2006).

## VISCANA

19. S. Amari, M. Aizawa, J. Zhang, K. Fukuzawa, Y. Mochizuki, Y. Iwasawa, K. Nakata, H. Chuman and T. Nakano *J. Chem. Information and Modeling*, **46**, 221-230 (2006).

## エストロゲン受容体

20. K. Fukuzawa, K. Kitaura, K. Nakata, T. Kaminuma and T. Nakano, *Pure Appl. Chem.*, **75**, 2405-2410 (2003).
21. K. Fukuzawa, K. Kitaura, M. Uebayasi, K. Nakata, T. Kaminuma and T. Nakano *J. Comp. Chem.*, **26**, 1-10 (2005).

22. K. Fukuzawa, Y. Mochizuki, S. Tanaka, K. Kitaura, and T. Nakano *J. Phys. Chem. B*, **110**, 16102-16110 (2006).
23. K. Maeda, A. Schug, H. Watanabe, K. Fukuzawa, Y. Mochizuki, T. Nakano, S. Tanaka “Effects of Point Mutations on the Binding Energies of Estrogen Receptor with Estradiol” *J. Comput. Chem. Jpn.*, **6**, 33-46 (2007).

#### DNA-タンパク(CRP)

24. K. Fukuzawa, Y. Komeiji, Y. Mochizuki, A. Kato, T. Nakano and S. Tanaka *J. Comp. Chem.*, **27**, 948-960 (2006).
25. T. Watanabe, Y. Inadomi, K. Fukuzawa, T. Nakano, S. Tanaka, L. Nilsson, and U. Nagashima “DNA and Estrogen Receptor Interaction Revealed by the Fragment Molecular Orbital Calculation” *J. Phys. Chem B*, submitted.

#### ナノ

26. T. Ishikawa, Y. Mochizuki, K. Imamura, T. Nakano, H. Mori, H. Tokiwa, K. Tanaka, E. Miyoshi, S. Tanaka “Application of fragment molecular orbital scheme to silicon-containing systems” *Chem. Phys. Lett.* **430**, 361–366 (2006).

#### CH/ $\pi$

27. Yuji Umezawa, Motohiro Nishio, “CH/ $\pi$  Interactions as Demonstrated in the Crystal structure of Guanine-nucleotide Binding Proteins, Src homology-2 Domains and Human Growth Hormone in Complex with their Specific Ligands”, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Volume 6, Issue 4, Pages 493-504* (1998,)
28. M. Nishio, M., Hirota, Y. Umezawa, "The CH/ $\pi$  Interaction Evidence, Nature, and Consequences", 1998, Wiley-VCH, New York
29. 西尾元宏「新版 有機化学のための分子間力入門」講談社 2008

#### ABINIT-MP

30. 中野、谷森、加藤、小池上、雨宮、福澤 「フラグメント分子軌道法入門 — ABINIT-MP によるタンパク質の非経験的量子化学計算— アドバンスソフト 2004
31. 佐藤、中野、望月編「プログラムで実践する生体分子量子化学計算」森北出版 2008
32. Dmitri G. Fedorov 編 “The FRAGMENT MOLECULAR ORBITAL METHOD” 2009 CRC Press

## BioStation Viewer

33. 加藤、福澤、望月、甘利、中野 「BioStation Viewer : 生体高分子の相互作用も解析と可視化」可視化情報 p124-129 Vol.26 No.101 2006.4
34. Wolfgang Kabsch and Christian Sander , "Dictionary of Protein Secondary Structure: Pattern Recognition of Hydrogen-Bonded and Geometrical Features", *Biopolymers*, Vol. 22, 2577-2637, 1983.

## 付録

### 1) ABINIT-MP 入力ファイル説明

別ファイルで説明

### 2) MOLDA 説明

別ファイルで説明