ProMode-Elastic 弾性ネットワークモデルの基準振動解析データベース

早稲田大学 輪湖 博

I. データベースの概要

1. 基準振動解析法

エネルギー極小構造のまわりのポテンシャル面を多次元の放物面で近似できるとしたとき、そ の系の揺らぎは、さまざまな周波数の単振動モードに分解することができる。それぞれの振動モ ードが呈する立体構造の揺らぎは対象となる系の動的特徴を表現しているが、特に低振動数モー ドの中に、機能と密接に関係するものがあるという報告がいくつかあり、注目されている。

2. 基準振動解析データベース

	<u>データ</u>	ベース	<u>対象</u>	<u>ポテンシャル形</u>
1	ProMod	e	単量体、単一のサブユニット	従来型 ^{a)}
2	ProMod	e-Oligomer	多量体(①②はタンパク質のみ)	従来型 ^{a)}
3	ProMod	e-Elastic	単量体 & 多量体(あらゆる分子)	弾性ネットワークモデル ^{b)}
	1	http://prom	ode. socs. waseda. ac. jp/ Bio	informatics, 20 (2004) 2035–2043.
	2	http://prom	ode.socs.waseda.ac.jp/promode_o	ligomer/
			Oper	n Bioinformatics J., 6 (2012) 9-19.
	3	http://prom	ode.socs.waseda.ac.jp/promode_e	elastic/ 準備中

仕様

①独立変数: 化学結合のまわりの回転角(二面角)

②ポテンシャル形:

- a) 従来型: 非共有結合(Lenard-Jones 型)、静電相互作用(Coulomb 型)、化学結合のまわりの回転などに関わるポテンシャル・エネルギー関数の総和。
- b) 弾性ネットワークモデル: 原子の種類に関係なく、すべて同じ関数形、同じパラメータ値 を用いる。 $K \exp(-\frac{(d_{ij}^{PDB})^2}{a^2})(d_{ij}-d_{ij}^{PDB})^2$ d_{ij} は原子 *i* と *j* の距離(変数)で、 d_{ij}^{PDB}

が PDB の構造における距離。バネ定数にあたる係数は距離の増大とともに減衰する。K、a は適当に決めた定数。

③エネルギー極小化:

従来型ポテンシャル関数では PDB の構造に対してエネルギー極小化を行う。 弾性ネットワークモデル③では PDB の構造が上記ポテンシャル関数の極小値となっている。

3. 得られる情報

時間平均

- ・二面角の揺らぎの大きさ。
- 各モードについて
 - ・原子の変位ベクトル。
 - ・二面角の揺らぎ。
- ・原子の揺らぎの大きさ。 ・2つの原子の揺らぎの相関。
 - 2つの二面角の揺らぎの相関。
 - 2つの原子の変位ベクトルの内積。

立体構造ビューワーjV、Jmolを使って揺らぎを見る。

- ・原子の揺らぎのアニメーション
- ・原子の変位ベクトル図

【例】1a6m myoglobin



II. 実習

0. 準備

0.1 弾性ネットワークモデルによる基準振動解析ソフト PDBn のダウンロード

ProMode-Elastic のトップページで

- ① ソフトウェアのダウンロード(あるいは <u>Download of Software</u>) をクリック
- ② 受諾します (あるいは I agree to the above conditions) ボタンをクリック
- ③ Windows 用実行ファイル(Windows executable) Window PDBETA v1.01 をクリックして、
 PDBETA-v1.01.zip を適当なフォルダーにダウンロードし、解凍する。
 PDBETA-v1.01 というフォルダーができる。
- ④ DSSP サイトへのリンク http://swift.cmbi.ru.nl/gv/dssp/ ヘアクセスし、実行ファイル (DSSPCMBI.EXE) をダウンロードする (オプション) http://swift.cmbi.ru.nl/gv/dssp/ にアクセス

Miscellaneous \Rightarrow <u>Distribution</u> \Rightarrow DSSP old \Rightarrow <u>Windows executable</u> 上記③でできたフォルダーPDBETA-v1.01/bin に DSSPCMBI.EXE を置く。

0.2 ビューワーjV のダウンロード

PDBj のトップページ (http://www.pdbj.org/index_j.html) 左側のメニューから サービス&ソフトウェア ⇒ jV: Graphic Viewer ⇒ ダウンロード・インストール ⇒ バイナリファイル[jV4.1] をクリックして使用条件承諾確認のページへ。 OAccept をクリックした後、next をクリックして、ダウンロードページへ。 jV4.0 を適当なフォルダーにダウンロードして、解凍する。

0.3 PDB データのダウンロード

PDBj のトップページ (http://www.pdbj.org/index_j.html) 本文内の「検索」の窓に PDB のエント リーコードを入力する。

今回は、DNAを含む、比較的小さい系を例として用いる: 3CRO と入力。

表の最初の行、PDB ファイルのダウンロードボタンをクリックして PDB データを適当なフォ ルダーにダウンロードする。

1. PDBn の操作方法

1.0 アプリケーションの起動

(1) PDBETA-v1.01 にある PDBETA_W.jar(あるいは PDBETA_W.bat)をダブルクリックして PDBη を起動する。 \rightarrow Page 1 が表示される。

1.1 Page 1

🕏 Self-calculation program of ProMode (version #)	(1) <u>PDB データ(新規計算)、あるいは</u>
Page 1 Popolo Help Inglish Japanese	<u>中間ファイル(再計算)のファイル名の入力</u>
Normal mode analysis of PDB data by Elastic model in Torsional Angle space	① PDB データ(新規計算)を入力データとする場合
H Imy project publicative de Seroi ent Browse	1) ONew calculation のラジオボタンを選択する。
The intermediate file (publicita) generated in the previous calculation is used. Browse	2) ファイル名を入力する。あるいは、
	Browseボタンを押してファイルを選択する。
	② 中間ファイル (再計算) の場合は○The intermediate file
	(.PDBeta) のラジオボタンを選択して、前回の計算で出力され
Back Nerd Cancel	ー た中間ファイルの名前(識別子.PDBeta)を入力する。

(2) <u>Next ボタンをクリックして次のページへ</u>(①の場合、Page 2a-1 へ。②の場合、Page 2b-1 へ進む)。本講習会では、②の場合は省略する。

1.2a-1 Page 2a-1

	n 1.01)			-				-
Page 2a-1		ρ	طل	⊃7	2	H	elp glish	Japanese
Select chains	and mol	ecules yo	u want to in-	clude in the	computatio	on.		
MOTA 😒	A*							-
MOTA 😒	8.							
MOTA 😒	L*							
ATOM	R*							1
HETATM	A HOH	25 water	molecules.					
HETATM	HOH B	25 water	molecules.					н
HETATM	HOHI		malandar					
Output file A user can The file nam	s specify o	25 water	tory and a p	orefix charc	ters of the	output f	les.	v
Output file: A user can: The file nam Directory	s specify o ies are a	25 water nty a direc utomatica	tory and a p	orefix charc	ters of the	output fi	les.	¥
Dutput file: A user can s The file nam Directory CiUsersiws	s specify o ies are a sseda'De	25 water nty a direc utomatica sktop/201	tory and a p by assigned 2PDBJ講習分	orefix chard	ters of the Brows	output fi	les.	v
Dutput file: A user can to The file nam Directory C'Usersiwa Prefix cha	s specify o les are a aseda/De aracters	25 water nty a direc utomatica sktop/201	tory and a p by assigned 2PDB旗留台 output file	PIDATA	ters of the Brows	output fi	les.	×
Dutput file: A user can : The file nam Directory C:Usersiwn Prefix cha pdb3cro	s specify o ses are a sseda'De aracteri	nly a direct utomatica sktop/201	tory and a p by assigned 2PDBJ算習当 output file	Prefix charc I. MDATA PS	ters of the Brows	output fi	les.	×
Dutput file: A user can : The file nam Directory C:Usersiw: Prefix cha pdb3cro	s specify o ses are a sseda'De aracters	a direct attraction sitop/201 s of the	tory and a p by assigned 2PDBJ講習当 output file	Profix charg	ters of the Brows	output fi	les.	
Dutput file: A user can : The file nam Directory C:Usersiwn Prefix cha pdb3cro	s specify o les are a sseda'De aracteri	a direct attornatica sktop/201	tory and a p By assigned 2PDR)화점님 output file	NDATA	ters of the	output fi	les.	
Dutput file: A user can The file nam Directory C:Usershot Prefix cha pdb3cro	s specify o tes are a sseda'De aracteri	nty a direct utomatica sktopi201 s of the	itory and a p lly assigned 2PD0(講習날 output file	YDATA	ters of the	output fi	les.	•
Dutput file: A user can : The file nam Directory C:Usershut Prefix cha pdb3cro	s specify o ses are a sseda'De aracter	nty a direct utomatica sktop/201 s of the	itory and a p lly assigned 2PDRJ과함함	POATA	ters of the	eutput fi	les.	v

(1) 計算に取り入れる鎖の選択

 計算に取り入れる鎖やヘテロ分子のチェックボックスを クリックして選択する。

デフォルトでは、PDB で ATOM のヘッダーをもつタンパ ク質、DNA、RNA が選択されている。鎖の途中に HETATM のヘッダーをもつ残基等が含まれる場合、デフォルトでは選 択されていないので注意が必要である。

(2) 出力ファイルの出力先ディレクトリーの入力

(3) ファイル名の接頭文字列の入力

出力ファイルに付けるファイル名の接頭文字列を入力する(ファイル名として使用できる任意の文字列)。すべての出力ファイル名はこの文字列から始まり、PDBηが定義する識別子が付けら

れる。デフォルトは、PDB データのファイル名。

(4) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 2a-2) へ

*** PDB データを読み込み、分子構造記述データを構築します。しばらくお待ちください。***

1.2a-2 Page 2a-2

PDBŋ (version 1.01)	必要なパラメータを設定します。
Page 2a-2	
The numbers of modes for which eigenvalues and eigenvectors are calculated.	しかし、ここではデフォルト値をそのまま使うことにし、
The time average properties are calculated using these eigenvalues and eigenvectors. All modes (1005 modes)	
The lowest 100 modes	(3)へ進みます。
Parameter setting	
Potential function between two atoms.	
$K \exp(-(d_{ij}^{PD\theta})^2 / a^2) (d_{ij} - d_{ij}^{PD\theta})^2$	
d_g and d_g^{PDI} are distances between atoms i and j in the distorted and PDB conformations, respectively.	(1) <u>考慮するモード数の指定</u>
K= 1.0 #= 5.0 A Cutoff distance = 100.0 Å	① すべてのモードを考慮する場合(デフォルト)、
Loop-closing potential for a bond such as a disulfide bond	〇All modes のラジオボタンをクリックする。
$K = \frac{100.0}{K(d_{ij} - d_{ij}^{FDB})^2}$ No cutoff distance.	
	()内にモードの総数が表示される。
Back Mext Cancel	② 指定した数の最低振動モードだけで時間半均を求める場

合(計算時間の短縮となる)。

○The lowest ── modes のラジオボタンをクリックし、考慮するモード数をボックスに入力する。モード数のデフォルト値は、100。

(2) ポテンシャル・エネルギー関数に関わるパラメータ値の入力

本計算では以下のポテンシャル・エネルギー関数が使われている。

$$K \exp(-\frac{(d_{ij}^{PDB})^2}{a^2})(d_{ij} - d_{ij}^{PDB})^2$$

*K、a、*カットオフ距離の値を入力する。カットオフ距離を指定すると、*d_{ij}*^{PDB}の値がその値より大きい原子ペア*i*,*j*に対してはポテンシャル・エネルギーを計算しない。

デフォルトは、K = 1.0、a = 5.0Å、カットオフ距離 = 100.0 Å。

② S-S 結合(注)に対する K を設定する。ただし、ポテンシャル・エネルギー関数は $K(d_{ii} - d_{ii}^{PDB})^2$ 。

Kの値を入力する。デフォルトは、K=100.0

(注)二面角系の基準振動解析では、回転可能な二面角をその内部に含む環状構造を扱えないの で、環状構造を固定するか、共有結合を一部切断して環を開き、その代わりに環状を維持するた めのポテンシャル・エネルギーを課す。

(3) <u>Next ボタンをクリックして次のページ (Page 3) へ</u>

1.3 Page 3

PDBn (version	1.01)			-
Page 3	pdt	7	Help English	Japanese
User's Opti	ons (1)			
Log files:	C:IUsersIwasedalDesktopi201	2PDB購習会/DATA	pdb3cro.log	
Title:	to appear in the first line of each	h output file		
Normal m	de analysis: pdb3cro			
Temperat	re is set so that the calculated	mean displacemen	nt of atoms is equal	to
🔾 mean di	placement of atoms obtained fr	om temperature fai	ctors in the PDB da	ta
€ 0.5 Å				
Time aver	ge properties: Atom P	ease check all the	at you want to cal	culate
Pluctua Fluctua	tion of atoms			
Cillsers	waseda/Desktopi2012PDB講習	会\DATA\pdb3cro.fl	catmA	
Correla	son between fluctuations of ato	ms		
C:IUsers	waseda/Desktopi2012PDB講習	会\DATA\pdb3cro.ci	rratmA	
⊛ CA	○ Side chain atom ○ CA	and side chain aton	n	

デフォルトを使うこととし、(4)に進む。

(1) <u>各出力ファイルの冒頭に出力する表題の入力</u>① 表題を入力。任意の文字列。

(2) 温度を設定する

といっても、弾性ネットワークモデルでは温度が設定でき ないので、基準振動の振幅を設定する。次の①あるいは②の どちらか一方のラジオボタンをクリックして選択する。

- ウノオルトは②。
- PDBデータの温度因子から得られる全原子の揺らぎの平均と、基準振動解析計算で得られた全原子の揺らぎの平均が一致するように温度(振幅)を設定する。両者を比較するには都合がよいが、一般に非常に大きな振幅となる。
- ② 基準振動解析計算で得られる全原子の揺らぎの平均値を指定する。ただし、0.0 が入力された 場合、①と同じとなる。ラジオボタンをクリックし、平均値を入力する。デフォルトは0.5 Å。

(3) 計算する物理量に関するオプション(1)

① 原子揺らぎの時間平均。 □ Fluctuation of atoms

原子揺らぎの時間平均を計算したい場合、チェックボックスをクリックする。

② 原子揺らぎの相関の時間平均。 □ Correlation between fluctuations of atoms

原子揺らぎの相関の時間平均を計算したい場合、チェックボックスをクリックする。

このとき、相関を計算したい原子の種類を指定する(すべての原子ペアを考慮すると、膨 大な数となるため)。次の3つの中から一つを、ラジオボタンをクリックして選択する。デ フォルトはCA。

OCA	Ca 原子
○Side chain atom	側鎖の代表原子
OCA and side chain atom	Cα 原子および側鎖の代表原子

(4) <u>Next ボタンをクリックして次のページ (Page 4) へ</u>

1.4 Page 4

🛃 PDBη (version 1.01)			×
Dana 4		Help	
Page 4		English	Japanese
User's Options (2)	Please check all that you want	to calculate	
Time average proj	perties: Dihedral angle		
Fluctuation of diher	Iral angles		
C:/Usersiwaseda/De	sktop/2012PDB)講習会/DATA/pdb3cro.fic	cangA	
Correlation betwee	n fluctuations of dihedral angles		
C:/UsersiwasedalDe	sktop/2012PDB講習会/DATA/pdb3cro.cr	rangA	
Psi Psi	Side chain dihedral angle		
O Psi and Phi	O Psi and Side chain dihedral angl	le	
	Г	Back Next	Cancel
			Juncen

デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

(1) 計算する物理量に関するオプション (2)

二面角揺らぎの時間平均。

二面角揺らぎの時間平均を計算したい場合、

②二面角揺らぎの相関の時間平均。

二面角揺らぎの相関の時間平均を計算したい場合、

このとき、相関を計算したい二面角の種類を指定する(すべての二面角ペアを考慮すると、膨 大な数となるため)。次の4つの中から一つを、ラジオボタンをクリックして選択する。デフォル トは Psi。

⊖Psi	主鎖二面角 ϕ
\bigcirc Side chain dihedral angle	側鎖の代表二面角
\bigcirc Psi and Phi	主鎖二面角 ϕ と ϕ
\bigcirc Psi and side chain dihedral angle	主鎖二面角φおよび側鎖の代表二面角

(2) <u>Next ボタンをクリックして次のページ (Page 5) へ</u>

1.5 Page 5



デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

(1) 計算する物理量に関するオプション(3)

個々の基準振動モードに対する計算に関するオプシオン。

① 物理量を計算するモード番号の指定。

物理量を計算するモード番号を入力する。参考として、モ ード総数が表示される。

あまり多くのモード番号を指定すると、計算時間がかかる だけでなく、膨大な量のデータが出力されるので注意が必要 である。デフォルトは、1-5 (第1番目~第5番目の低振動

数モード)。

(2) <u>Next ボタンをクリックして次のページ (Page 6) へ</u>

1.6 Page 6

PDBŋ (versio	n 1.01)					
Dage 6		bdt	22	H	elp	
Pagelo				Eng	lish	Japanese
User's Opt	ons (4)	Please chec	k all that you	want to calc	ulate	
Propertie	s of each no	ormal mode				
Fluctu	ation of atoms					
C:Use	rs/waseda/Des	ktopi2012PDBjj库设	冒会\DATA\pdb3	cro_1.flcatml		
C:Use	siwaseda/Des	ktopi2012PDBjjj#2	学会/DATA/pdb3 P会/DATA/pdb3	cro_2.flcatml		
C:IUse	rs/waseda/Des	ktopi2012PDBate2	会(DATA/pdb3	cro_4.ficatmE		
C:IUse	siwaseda/Des	ktop(2012PDB	冒会\DATA\pdb3	cro_5.flcatm8		
Fluctu	ation of dihedr	al angles				1
C:IUse	rsiwaseda/Des	ktopi2012PDBjjjjkj2	留会/DATA/pdb3	cro_1.ficangE		1
Cillse	siwaseda/Des	ktopi2012PDB曲音	全全(DATA pdb3	cro_2.ficangE		
Cillse	rs/waseda/Des	ktopi2012PDBjarg	会(DATA)pdb3	cro_3.ficange		
C:/Use	/s/waseda/Des	ktopi2012PDBjjjj	学会/DATA/pdb3	cro_5.ficangE		
				Back	Next	Cancel

デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

(1)<u>計算する物理量に関するオプション</u>(4)
計算したい物理量をクリックして選択する。
① 原子の揺らぎ □Fluctuation of atoms
② 二面角の揺らぎ □Fluctuation of dihedral angles それぞれ、ボックス内に出力ファイル名が表示される。

(2) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 7) へ

1.7 Page 7

Pag 2 Light Li	🛃 PDBη (version 1.01)	**
User's Options (5) Please check all that you want to calculate Animation of each normal model Modes for which animation data are generated 1.5 (5) Specified in the previous page) Number of frames 1 joids number) Anginutive * mean displacement 0.5 A or 0 scaling factor Immittive * mean displacement 0.5 A or 0 scaling factor Collectrivaseed/Desktop/0172P06882 (0.011Aptb.2cro_1 sam.pdb Collectrivaseed/Desktop/0172P06882 (0.011Aptb.2cro_1 sam.yz) Collectrivaseed/Des		Help English Japanese
Animation of each normal mode Hodes for which animation data are generated 1.5 (Specified in the periods namber) Number of frames Anipation 2 (Specified in the periods namber) Anipation 2 (Specified in the period namber) Collestivased and the strain of the strai	User's Options (5) Please check all that you want	t to calculate
Index for which animation data are generated 1.1 (Specified in the previous page) Number of frams 1 (odd number) Angitude Image: Specified in the previous page Image: Specified in the previous page Angitude Image: Specified in the previous page Image: Specified in the previous page Image: Specified in the previous page Characterization data for [VFORIG and Jund Image: Specified in the previous page Image: Specified in the previous page Image: Specified in the previous page Characterization data for [VFORIG and Jund Image: Specified in the previous page Image: Specified in the previous page: Specified in the previous page Image: Specified i	Animation of each normal mode	
1.5 (Specified in the previous page) Number of frames 11_0004 number) Anginudo	Modes for which animation data are generated	
ClUdersiwaseddDesktog2017000最客金(DATApdb3cro_4-am.pdb ClUdersiwaseddDesktog2017000最客金(DATApdb3cro_5-amm.pdb ClUdersiwaseddDesktog2017000最客金(DATApdb3cro_1-amm.ydz ClUdersiwaseddDesktog2017000最容金(DATApdb3cro_1-amm.ydz ClUdersiwaseddDesktog2017000國容金(DATApdb3cro_2-amm.ydz ClUdersiwaseddDesktog2017000國容金(DATApdb3cro_2-amm.ydz ClUdersiwaseddDesktog2017000國容金(DATApdb3cro_4-amm.ydz ClUdersiwaseddDesktog2017000國容金(DATApdb3cro_5-amm.ydz	1.5 (Specified in the previous page) Number of frames 1 [edd number] Amplitude mean displacement 5 Å or scalin Animation data for /N/POB) and Jmod C::Users/usesedaDesktop/2012POB@@@ 201A1poblacro C::Users/usesedaDesktop/2012POB@@ 201A1poblacro C::Users/usesedaDesktop/2012POB@@ 201A1poblacro C::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro C::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro C::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro C::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro C::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro C::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro C::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro C::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro S::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro C::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro S::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro S::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro S::Users/usesedaDesktop/2014Doblacro S:	g factor 20 t anm.pdb 2anm.pdb
□ Animation data for ChannedIDL3 Culturerivmsend/Deshtop2012P006度等金; DATApdbScro_1-anm.xyz Culturerivmsend/Deshtop2012P006度等金; DATApdbScro_2-anm.xyz Culturerivmsend/Deshtop2012P006度等金; DATApdbScro_4-anm.xyz Culturerivmaned/Deshtop2012P006度等金; DATApdbScro_5-anm.xyz Culturerivmaned/Deshtop2012P006度等金; DATApdbScro_5-anm.xyz	C:/UsersiwasedalDesktop/2012PDB購習会/DATA/pdb3cro_4 C:/UsersiwasedalDesktop/2012PDB購習会/DATA/pdb3cro_4	4-anm.pdb 5-anm.pdb
Colliver's wased Orbitskip) 707 FORB 또는 NATA Publicities, Lamm, xyt Colliver's wased Orbitskip 2017 FORB 또한 ACN Field Science, Zamm, xyt Colliver's wased Orbitskip 2017 FORB 또한 ACN Field Science, Zamm, xyt Colliver's wased Orbitskip 2017 FORB 또한 ACN Field Science, Zamm, xyt Colliver's wased of Desktop 2017 FORB 또한 ACN Field Science, Samm, xyt Colliver's wased of Desktop 2017 FORB 또한 ACN Field Science, Samm, xyt	Animation data for Chime(MDL)	
	C:Ubers invessed / Desktop;2012F00員報金(A)A Adobt 2-ro. C:Ubers invessed / Desktop;2012F00員報金(A)Adobt 2-ro. C:Ubers invessed / Desktop;2012F00員報金(A)A Adobt 2-ro.	I-anm.xyz -anm.xyz -anm.xyz -anm.xyz -anm.xyz -anm.xyz
Back Mext Cancel	8	ack Next Cancel

デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

- (1)<u>アニメーションに関するオプション</u>
- ① アニメーションに関するパラメータの入力。
- 1) アニメーションのフレーム数を入力する。

デフォルトは、11。

アニメーションにおける振動の振幅を指定する。
 揺らぎの平均値(デフォルト;デフォルト値 0.5Å)、ある
 いは計算値に対する倍率で指定する。

Page 3 で指定した振幅では、アニメーションにした場合、動きが小さくてよくわからない ことがある。そこで、動きを少し誇張してわかりやすくしたい場合、振幅を大きく設定する。

② アニメーションを表示するソフトの選択

1) jV(PDBj) あるいは Jmol の場合は、□Animation data for jV(PDBj) and Jmol を選択。

2) Chime の場合は、□Animation data for Chime(MDL)を選択。

それぞれ、ボックス内に出力ファイル名が表示される。

(2) <u>Next ボタンをクリックして次のページ (Page 8) へ</u>

1.8 Page 8



デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

(1) <u>jV(PDBj)</u>あるいは Jmol で表示する変位ベクトルに関 するオプション

① 変位ベクトルの倍率

変位ベクトルの平均値(デフォルト;デフォルト値 2.5Å)、 あるいは計算値に対する倍率で指定する。

Page 3 で指定した振幅では、長さが短くてよくわからないことがある。そこで、少し誇張してわかりやすい長さに設定する。

なお、負の値を入力すると、変位ベクトルは逆向きとなる。

② 描画する変位ベクトルの線の太さを入力する。デフォルト値は、2.0。

③ 描画する変位ベクトルの線の色を RGB の値で指定する。

ベクトルの根元部分半分と先端部分半分で色を変えることができる。(変位ベクトルは、矢印で はなく、単に線分で表示しているので、その向きを色で区別している)。デフォルト値は、根元部 分R=0、G=128、B=0、 先端部分R=255、G=0、B=0。

④ jV(PDBj)で表示する変位ベクトル用のデータを出力したい場合、□Displacement vector data for the jV viewer のチェックボックスを、Jmol 用のデータを出力したい場合、□Displacement vector data for the Jmol viewer のチェックボックスをクリックして選択する。

(2) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 9) へ

1.9 Page 9



(1)計算の実行。
 Execute ボタンをクリックする。
 表示が更新され、計算の途中経過がボックスに表示される。計算が終了すると、次のページ (Page 10)へと進む。
 エラーが発生した場合は、その旨表示される。

計算実行中!! しばらくお待ちください。

1.10 Page 10



アプリケーションの終了。
 Finish ボタンをクリックし、ジョブを終了する。

2. 出力ファイル ファイル内部の書式等、詳細はPDBηのHelpをご覧ください。

以下のxxxxはユーザーがPage2a-1で指定したファイル名の接頭文字列を表します。 ⇒ EXCELとあるのは、EXCELなどで読み込み、グラフとして表示してください。

xxxx.flcatmA	原子のゆらぎ	\Rightarrow	EXCEL		
xxxx.crratmA	原子のゆらぎの相関	\Rightarrow	EXCEL		
xxxx.flcangA	二面角のゆらぎ	\Rightarrow	EXCEL		
xxxx.crrangA	二面角のゆらぎの相関	\Rightarrow	EXCEL		
xxxx_n.flcatmE	第n番目のモードに対する原子の	ゆら	ぎ	\Rightarrow	EXCEL
xxxx_n.flcangE	第n番目のモードに対する二面角	のゆ	いらぎ	\Rightarrow	EXCEL
xxxx_n-anm.pdb	第n番目のモードに対するjVおよ	びJı	mol用のアニン	メーミ	ション・データ
xxxx_n-anm.xyz	第n番目のモードに対するChime	e 用の)アニメーショ	レン・	データ
xxxx_n-vec.xml	第n番目のモードに対する	変位-	ベクトル図用 [、]	デー	タ(jV用)
xxxx_n-vec.Jmol-scrip	t 第n番目のモードに対する	変位-	ベクトル図用・	デー	タ(Jmol用)

以下は計算に関する情報データである。

xxxx.log基準振動計算のログxxxx_mol.logPDBデータから分子構造記述データを作成したときのログxxxx-note.txt設定したパラメータ、オプションなどの記録xxxx.pdbeta再計算用の中間ファイル (バイナリーファイル)xxxx.molPDBデータから作成した分子構造記述データxxxx.dsspDSSP (二次構造の同定)の出力結果 (DSSPを組み込んでいる場合のみ)	xxxx-min.pdb	計算した鎖、分子だけを含むPDBデータ(座標値はオリジナルのものと全く同じ)
xxxx_mol.logPDBデータから分子構造記述データを作成したときのログxxxx-note.txt設定したパラメータ、オプションなどの記録xxxx.pdbeta再計算用の中間ファイル (バイナリーファイル)xxxx.molPDBデータから作成した分子構造記述データxxxx.dsspDSSP (二次構造の同定)の出力結果 (DSSPを組み込んでいる場合のみ)	xxxx.log	基準振動計算のログ
xxxx-note.txt設定したパラメータ、オプションなどの記録xxxx.pdbeta再計算用の中間ファイル (バイナリーファイル)xxxx.molPDBデータから作成した分子構造記述データxxxx.dsspDSSP (二次構造の同定)の出力結果 (DSSPを組み込んでいる場合のみ)	xxxx_mol.log	PDBデータから分子構造記述データを作成したときのログ
xxxx.pdbeta再計算用の中間ファイル (バイナリーファイル)xxxx.molPDBデータから作成した分子構造記述データxxxx.dsspDSSP (二次構造の同定)の出力結果 (DSSPを組み込んでいる場合のみ)	xxxx-note.txt	設定したパラメータ、オプションなどの記録
xxxx.molPDBデータから作成した分子構造記述データxxxx.dsspDSSP(二次構造の同定)の出力結果(DSSPを組み込んでいる場合のみ)	xxxx.pdbeta	再計算用の中間ファイル (バイナリーファイル)
xxxx.dssp DSSP (二次構造の同定)の出力結果 (DSSPを組み込んでいる場合のみ)	xxxx.mol	PDBデータから作成した分子構造記述データ
	xxxx.dssp	DSSP(二次構造の同定)の出力結果(DSSPを組み込んでいる場合のみ)

3. 結果のjVでの表示

ダウンロードした jV を起動する (jv4_0_signed.jar をダブルクリック)。

3.1 アニメーション

モード番号 n の基準振動の jV 用のアニメーション・データ xxxx_n-anm.pdb を使う。 xxxx_n-anm.pdb には PDB データと同じ書式で、アニメーションのフレーム数 n_f に相当するだけの 立体構造データがそれぞれ MODEL 行と ENDMDL 行に挟まれて出力されている。(jmol でも使う ことができる。使い方については、PDB η の Help を参照)

① xxxx_n-anm.pdb ファイルを読み込む。

 $[File] \rightarrow [Open-Local] \rightarrow [Animation]$

∯ jV								
File	Display	Colors	Options	Help				
Оре	en - Local	Þ	PDBML					
Open - Remote 🔹 🕨			PDB					
Information			Polygon					
Close 🕨			Script					
Save 🕨		,	Animation					
Exit								

アニメーションをスタートさせる。

 $[Options] \rightarrow [Animation]$



③ アニメーションの操作パネルが現れるので、
 □swing にチェックを入れ、再生ボタン
 □をクリックする。

swing にチェックを入れることで、データ内の立体



構造が 1, 2, …, n_{f-1} , n_{f} , n_{f-1} , …, 2, 1 の順に表示さ れ、これが繰り返される。ここで n_{f} は、データ内に含まれる立体構造の総数である。

3.2 変位ベクトルを描画する

① jV を起動し、対応する PDB データを読み込む。

 $[File] \rightarrow [Open-Local] \rightarrow [PDB]$

② 変位ベクトル描画用ファイル xxxx_n-vec.xml を読

み込む。

 $[File] \rightarrow [Open-Local] \rightarrow [Polygon]$

②の操作を繰り返して、複数のモードの変位ベクトル描画用ファイルを読み 込むことができる。複数のモードの変位ベクトルを読み込んだ場合、モードごとに表示・非表

e Display Colors Options Help PDBML Open - Remote Information Polygon iV Close Script Display Colors Options Help Animation • PDBMI Save Open - Remote PDB pdb3cro.ent Information pdb3cro_1-anm.pdb Script Close Exit Animation Save pdb3cro.ent pdb3cro_1-anm.pdb Exit

示を後から指定できる。

(注意) PDB データの構造と変位ベクトルとは同じ座標系になくてはならない。①、②の操作 中、画面に表示された構造や変位ベクトルに対して、回転、並進、拡大・縮小といった操作を すると、両者の構造間にずれが生じる。ちょっとしたマウス操作で、思いもかけずこうした操 作を行ってしまうことがあるので注意する必要がある。

jV の使い方

マウスの基本操作

X軸(左右方向軸)、Y軸(上下方向軸)回転	左ドラッグ
Z軸(奥行き方向軸)回転	Shift + 右ドラッグ(左右方向)
X軸(左右)方向、Y軸(上下)方向に移動	右ドラッグ
Z 軸(奥行き)方向に移動(拡大・縮小)	Shift + 左ドラッグ

メニュー操作

File	Display	Colors	Options	Help

コマンド操作

select コマンドで一群の原子を選択し、選択した原子群に操作を加える、のが基本操作。

select 原子表現

原子表現: 基本表現は [残基 ID][:鎖 ID][.原子名] あるいは グループ名 論理値演算子である'and'、'or'、'not'、そして括弧を使った表現ができる。

例: select 10-20,25-35 残基番号 10-20、25-35 の原子
 select *:A and mainchain select *.CA and not PRO PRO を除くすべてのアミノ酸残基の Ca 原子
 select (helix,sheet) and hydrophobic α-helix あるいはβ-sheet に含まれる疎水性残基の原子

グループ名には、アミノ酸名 (ALA, GLY など)、アミノ酸の属性 (hydrophobic, polar, small など)、二次構造 (helix, sheet, turn など)、分子の種類 (protein, DNA, RNA, water, hetero など) などが指定できる。また、PDB データ内の原子の通し番号、MODEL-ENDMDL に対するモデ ル番号などを使って、atomno=342 とか、model=2 というような指定も可能である。

select を宣言した後、さまざまな操作を指示する。

メニューの Display で分子の表示方法を指定する。コマンドを使ってより細かな指定もできる。 メニューの Colors で色を指定する。あるいは color コマンドで色を指定する。 color コマンドの例: color green あるいは color [10,225,100] (RGB での指定)

displayatom on/off 選択した原子群の表示/非表示 も便利なコマンドである。

詳しくは、PDBj のマニュアル http://www.pdbj.org/jv/manual/index_ja.html を参照。