

分子ビューアMolmilの使い方

大阪大学 蛋白質研究所
蛋白質データベース開発研究室
特任准教授 川端 猛

2020年9月16日(水)—18日(金)

Molmilとは



Gert-Jan Bekker

- PDBjのGert-Jan Bekker氏が開発した分子ビューア
- ブラウザ内で分子を表示
- インストール作業が不要
- JavaScriptとWebGLで開発
- ブラウザ内の標準的なビューアJSmolに比べて、表示がきれいで動作が速い
- mmCIFファイルにきちんと対応

Gert-Jan Bekker, Haruki Nakamura & Akira R. Kinjo. Molmil: a molecular viewer for the PDB and beyond. Journal of Cheminformatics 8, Article number: 42 (2016)

ノイラミニダーゼのPDBの構造の観察

PDB_ID: 2ht7 のページ

2HT7

N8 neuraminidase in open complex with oseltamivir

2HT7 の概要

関連するPDBエントリー

分子名称

機能のキーワード

由来する生物種

細胞内の位置

ポリマー鎖数

分子組成

構造登録者

主引用文献

実験手法

ダウンロード

構造

非対称単位を表示

生物学的単位を表示



構造

非対称単位を表示

ヘルプ

Molmilで表示

jVで表示 (NA)

Jmolで表示 (NA)

JSmolで表示

molmilで表示



構造

非対称単位を表示

ヘルプ

Molmilで表示

jVで表示 (NA)

Jmolで表示 (NA)

JSmolで表示

JSmolで表示



2ht7 chain A: UniProt: NRAM_I63A3
 Neuraminidase EC=3.2.1.18 GN Name=NA
 Influenza A virus (strain A/Duck/Ukraine/1/1963 H3N8).

-!- FUNCTION: Catalyzes the removal of terminal sialic acid residues from viral and cellular glycoconjugates. Cleaves off the terminal sialic acids on the glycosylated HA during virus budding to facilitate virus release. -!- CATALYTIC ACTIVITY: Reaction=Hydrolysis of alpha-(2->3)-, alpha-(2->6)-, alpha-(2->8)- glycosidic linkages of terminal sialic acid residues in oligosaccharides, glycoproteins, glycolipids, colominic acid and synthetic substrates.; EC=3.2.1.18; -!- SUBUNIT: Homotetramer.

マウスの使い方

表示法	<i>JSmol</i>	<i>molmil</i>
分子の回転	左ボタンで画面をドラッグ	左ボタンで画面をドラッグ
分子の並進	Ctrlキーを押しながら、右ボタンで画面をドラッグ	中ボタン(ホイール)で画面をドラッグ
ズームイン・アウト	(1)ホイールを回す (2)Shiftキーを押しながら、左ボタンで画面をドラッグ (3)右ボタンと左ボタンを同時に押して、画面をドラッグ	(1)ホイールを回す (2) 右ボタンで画面をドラッグ
マウスによる 残基名・原子 名の確認	(1)左ボタンで原子をクリックすると、画面下に表示される (2)画面上で、カーソルを原子の上に置き、しばらく待つと、ポップアップでラベルが表示される	左ボタンで原子をクリックすると、画面下に表示される

メニューによる表示の変更

デフォルト

左クリック

左クリック

右クリック

Display:
Ca trace

Color:
structure

Structures:
>
>
> + 2HT7 (#1)

Chains:
+ A
+ B (A)

Chain A > Display

- Hidden
- Default
- Amino acid >
- Sidechain >
- Ca trace
- Tube
- Cartoon
- Rocket
- CG Surface
- Simple Surface
- Hydrogen bonds

Chain A > Color

- Default
- Structure
- Atom (CPK)
- Group
- ABEGO
- Custom

Structures:
>
>
> - 2HT7 (#1)

Chains:
+ A
+ B (A)

Chain A

- Display
- Color
- Label

コマンドラインの表示

(2) Pymol-like command line interfaceが表示される

(1) メニューアイコン



を左ボタンでドラッグし、
[Toggle CLI]を選ぶ



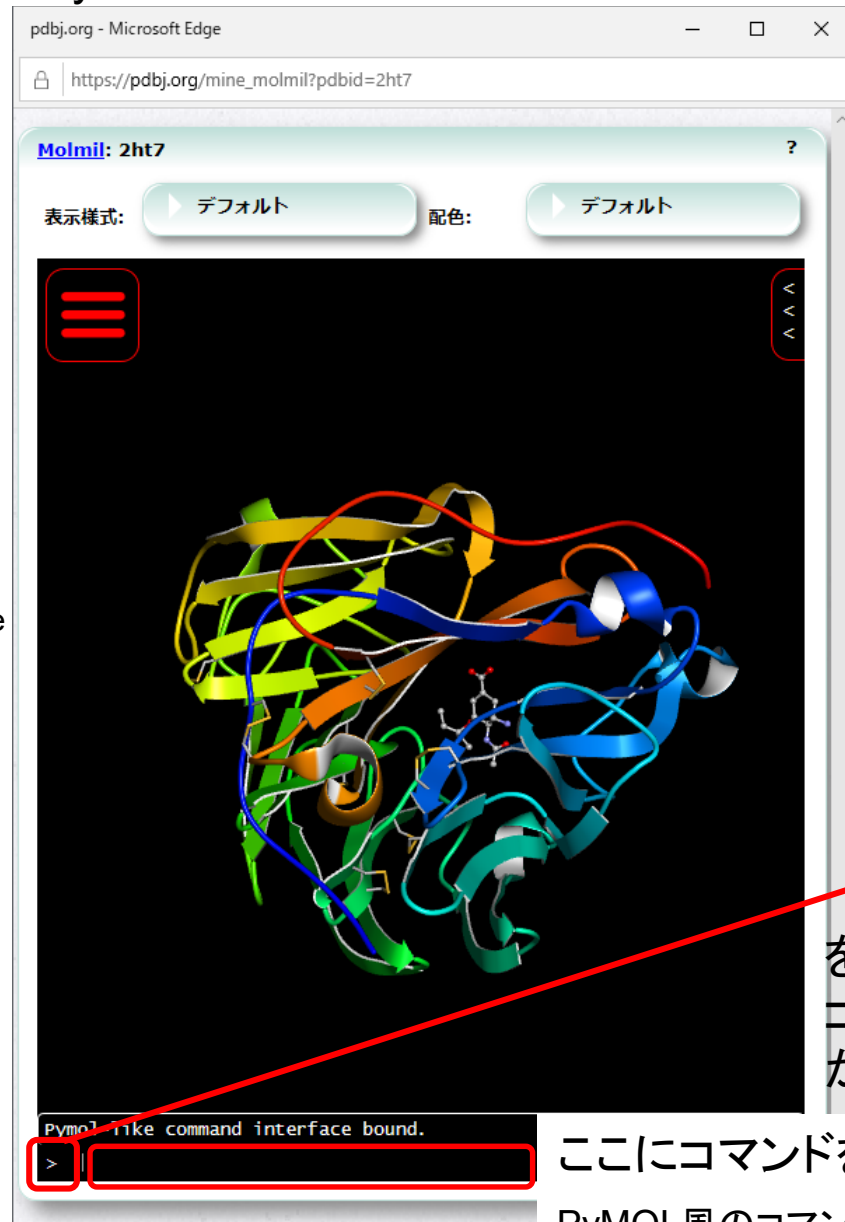
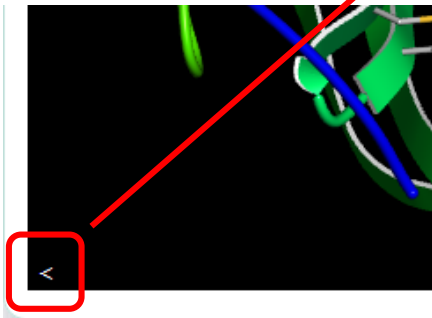
※もう一度、
[Toggle CLI]を
選ぶと、
コマンドライン
が消える

CLI :
Command Line Interface

あるいは、画面下の



をクリック



をクリックすると
コマンドライン
が消える

ここにコマンドを入力

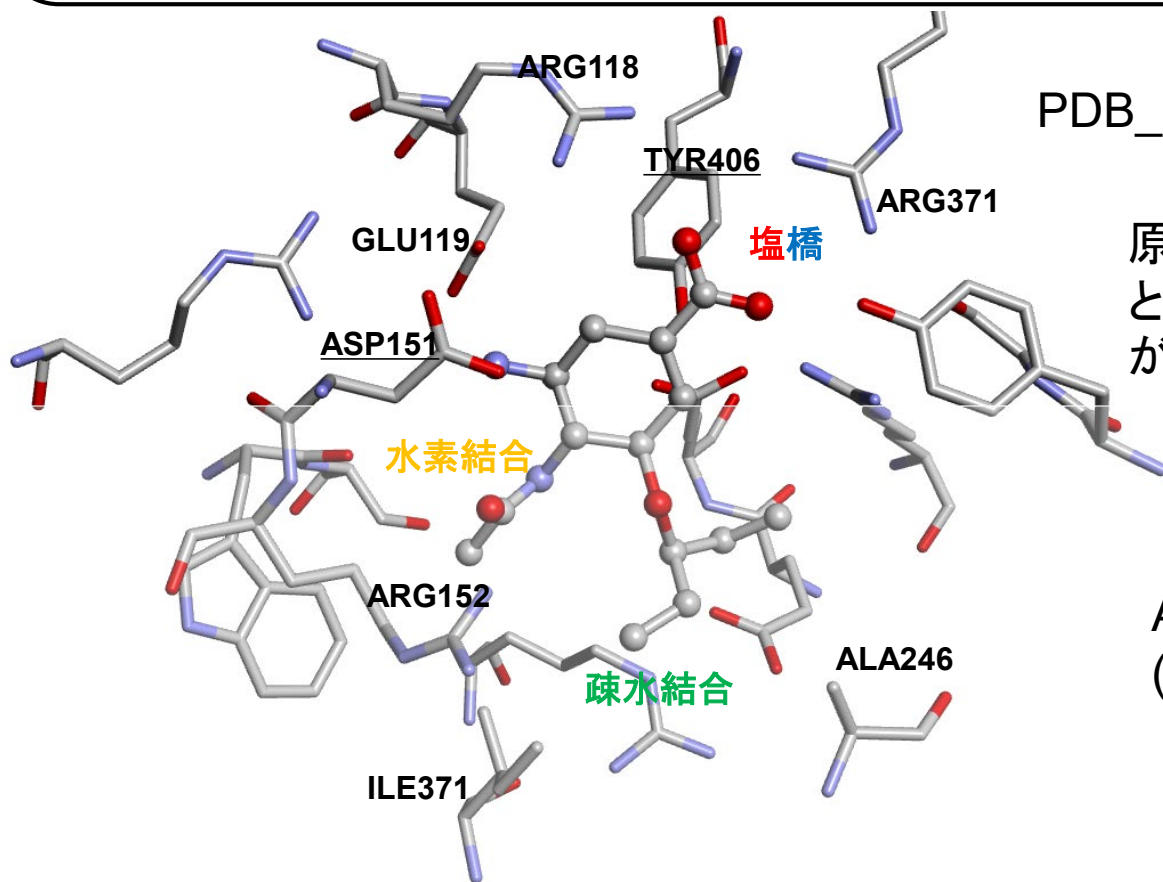
PyMOL風のコマンドを入力できる

コマンド入力:リガンド周辺原子の表示

スペースを必ず入れること!

コマンドラインインターフェースに以下のコマンドを入力する

```
hide cartoon, all           #カートゥーン表示をオフ
hide ball_stick, all        #スティック表示をオフ
show sticks, byres  #分子G39の周辺5 Åの残基を選択
color cpk, all              #原子の色をCPKに
show ball_stick, resn G39   #選択した原子を、太さ50のワイアフレームで表示
```



PDB_ID:2HT7 のG39周辺の構造

原子をマウス左ボタンでクリックすると、その残基名・残基番号・原子名が、左下に表示される

ASP151, TYR406は活性部位
(UniProt: NRAM_I63A3)

ASP151: Proton Donor/Acceptor
TYR406: Nucleophile

MolmilコマンドとPyMOLコマンドの違い

デフォルトの蛋白質がカートゥーン表示のときに以下のコマンドを実行する場合

1. “,all”が必要

- × `hide cartoon` 何も起きない...
- `hide cartoon,all` カートゥーンが消えてくれる！

2. “color”と”cartoon_color”を区別

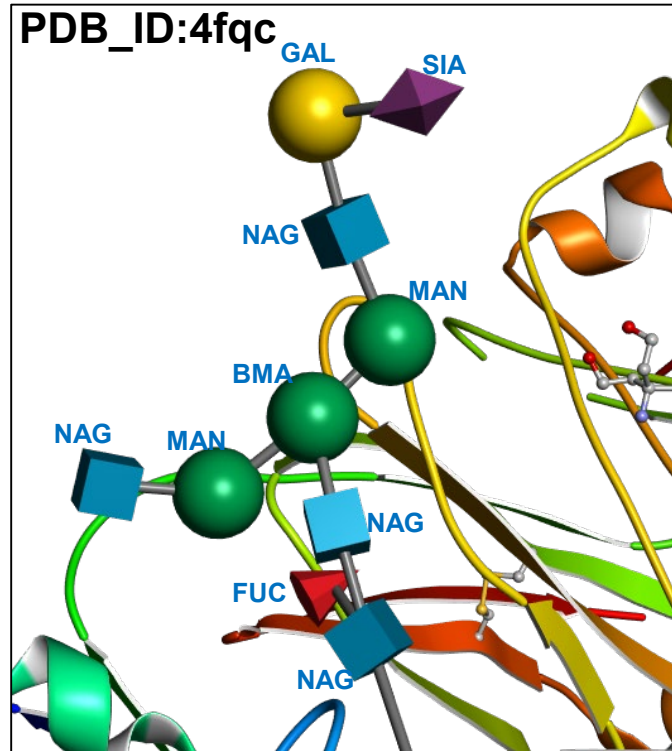
- × `color red,all` 何も起きない...
- `cartoon_color red,all` カートゥーンの色が赤くなる！

糖鎖の表示

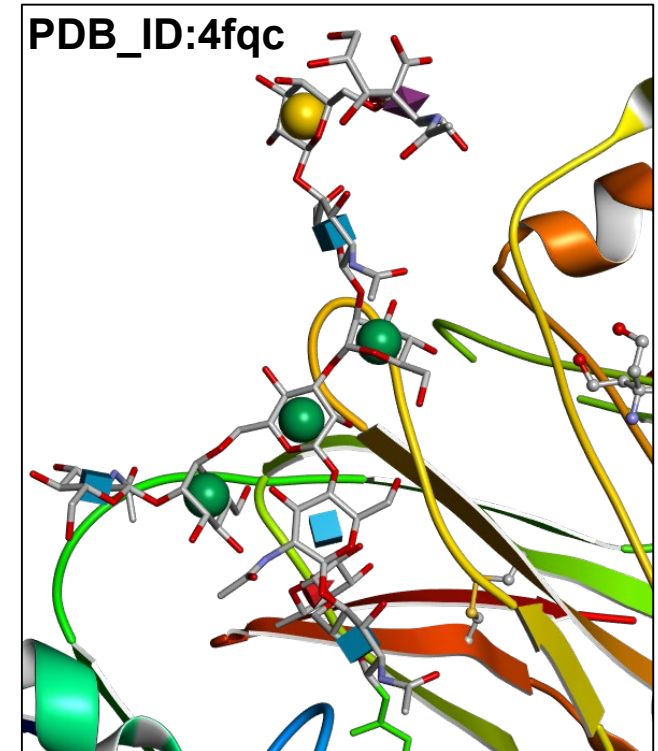
PDB_ID:4fqcを表示してみる

Crystal Structure of PGT121 Fab Bound to a complex-type sialylated N-glycan

立体化された
SNFGによる
カートゥーン表示

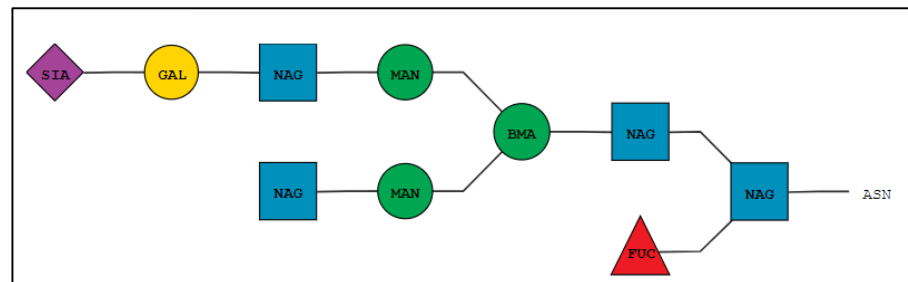


show cartoon,snfg



show snfg-icon,snfg

SNFG
(Simple Nomenclature For Glycan)



Molmil コマンド早見表 : 選択コマンド

選択コマンドの書式	例	意味
[実行], all	show sticks, all	全ての原子を棒表示
[実行], chain [鎖]	cartoon_color red, chain A	A鎖のカートウーンを赤に
[実行], resn [残基名]	show sticks, resn CYS	システインを棒表示
[実行], name [原子名]	show spheres, name CB	CB原子を球表示に
[実行], symbol [元素名]	show spheres, symbol S	硫黄元素を球表示に
[実行], entity [エンティティ番号]	show spheres, entity 3	エンティティ3を球表示に
[実行], resi [番号]	show spheres, resi 104	104番目を球表示に
[実行], resi [番号]+[番号]	show spheres, resi 104+212	104番目と212番目を球表示に
[実行], resi [番号]-[番号]	show spheres, resi 104-212	104~212番目を球表示に
[実行], [条件] around [距離]	show sticks, resn ATP around 5	ATPから5Å以下の原子を棒表示に
[実行], byres ([条件] around [距離])	show sticks, byres (resn ATP around 5)	ATPから5Å以下の残基を棒表示に
[実行], [条件] and [条件]	show spheres, chain A and resi 104	A鎖の104番目を球表示に
[実行], [条件] or [条件]	show sticks, resn SER or resn THR	セリンかスレオニンを棒表示に
[実行], hetatm	show spheres, hetatm	HETATMを球表示に
[実行], hydro	show spheres, hydro	水分子を球表示に
[実行], snfg	show cartoon, snfg	SNFG表示可能な糖鎖をカートウーンに
select [選択原子名], [条件]	select actsite, resi 104+212	104と212番目をactsiteと命名
[実行], [選択原子名]	show spheres, actsite	選択したactsiteを球表示に

Molmil コマンド早見表 : 実行コマンド

実行コマンドの書式	例	意味
<code>show</code> [表示法]	<code>show spheres, all</code>	球モデルの非表示
<code>hide</code> [表示法]	<code>hide spheres, all</code>	球モデルの表示
※ [表示法]は、球: <code>spheres</code> 、線: <code>lines</code> 、スティック: <code>sticks</code> 、ボール&スティック: <code>ball_stick</code> 、カートゥーン: <code>cartoon</code> 、バックボーン: <code>ca-trace</code> 、SNFGとスティック: <code>snfg-icon</code>		
<code>color</code> [色]	<code>color blue, all</code>	青色にする
<code>cartoon_color</code> [色]	<code>cartoon_color red, all</code>	カートゥーンの色を赤にする
<code>color</code> [r,g,b]	<code>color [0,255,255],all</code>	シアン色[0,255,255]にする
<code>color cpk</code>	<code>color cpk, all</code>	元素ごとに色分けする
※次の[色]も使用できる。N末からC末へ青から赤: <code>group</code> 、二次構造による色分け: <code>structure</code> 、温度因子による彩色: <code>bfactor</code>		
<code>bg_color</code> [色]	<code>bg_color white</code>	背景を白に
<code>turn</code> [xyz], [回転角(°)]	<code>turn y, 180</code>	Y軸のまわりに180° 回転
<code>reset</code>	<code>reset</code>	分子を元の向きに戻す
<code>Set cif_use_auth</code> , [onかoff]	<code>set cif_use_auth,off</code>	<code>label_asym_id</code> を鎖識別子に、 <code>label_seq_id</code> を残基番号に