

tplgeneL 詳細設計書

2018 年 2 月 5 日

Copyright (C) 2006-2018 Next Generation Natural Product Chemistry (N²PC)

— 目次 —

1. 低分子トポロジージェネレータ tplgeneL.....	1
2. tplgeneL の処理.....	2
2-1. 分子情報取得.....	2
2-1-1. tplgeneL オリジナル入力ファイル.....	2
2-1-2. Sybyl mol2 入力ファイル.....	3
2-2. 原子タイプ割り当て基本情報取得.....	4
2-3. 分子トポロジージェネレーション.....	8
2-4. DB の読み込み.....	8
2-4-1. 原子タイプ割り当て規則 DB 読み込み.....	9
2-4-2. パラメータ DB 読み込み.....	18
2-4-3. フラグメント DB 読み込み.....	24
2-4-4. 不足パラメータ動的補填用パラメータ情報.....	30
2-4-5. nonbond パラメータ情報.....	31
2-5. 原子タイプ割り当て.....	34
2-6. パラメータ割り当て.....	35
2-7. フラグメント DB パラメータ割り当て.....	39
2-8. トポロジージェネレーション出力.....	40
2-9. PDB ファイル出力.....	40

1. 低分子トポロジージェネレータ tplgeneL

tplgene では計算できないリガンド等の低分子については、tplgeneL を使用してトポロジーファイルを作成する。tplgeneL の処理として、量子化学計算を行った後、その結果から必要な情報を抽出し、それらの情報を用いてトポロジーファイルを作成する。また、tplgeneL はより一般的なファイル形式として Sybyl mol2 ファイル形式の入力についても対応する。tplgeneL の処理の概略を以下に示す。

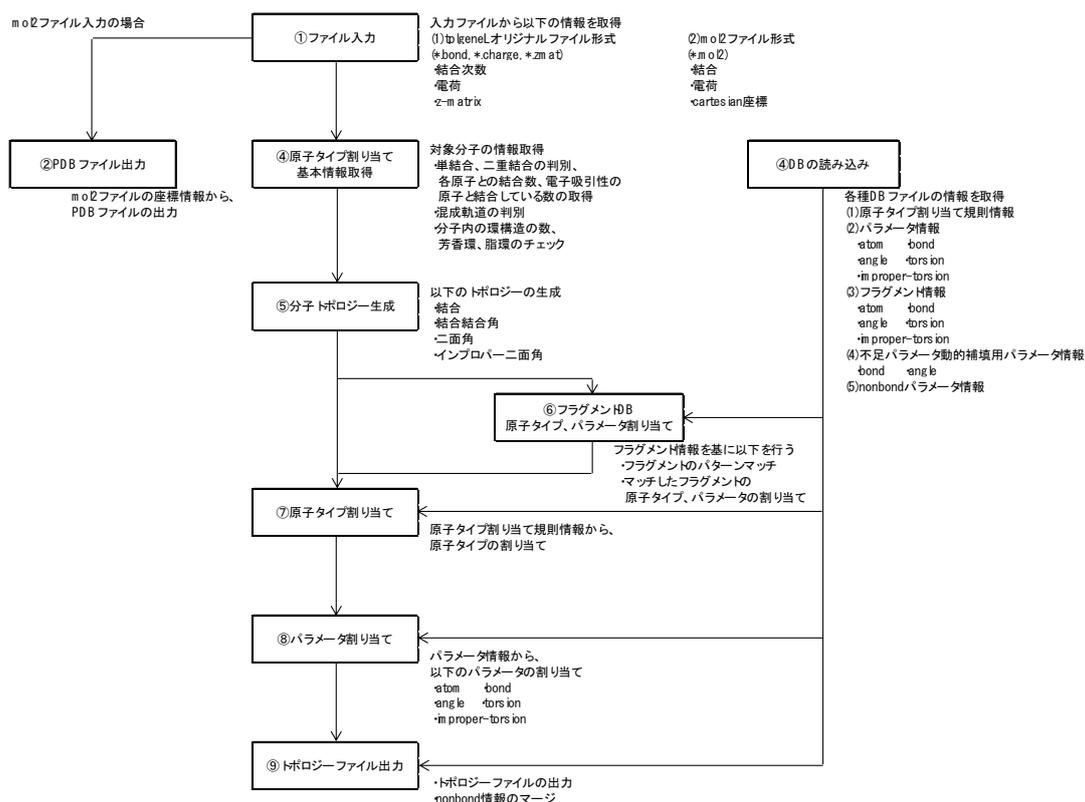


図. 低分子トポロジージェネレータ tplgeneL の処理概要

2. tplgeneL の処理

2-1. 分子情報取得

tplgeneL は電荷情報、結合情報、座標情報を入力とする。現在、tplgeneL は以下の二つのファイル形式に対応している。

- tplgeneL オリジナルファイル形式
- Sybyl mol2 ファイル形式

2-1-1. tplgeneL オリジナル入力ファイル

電荷情報、結合情報、座標(Z-matrix)情報ファイルをもとに計算を行う。

①電荷情報ファイル(XXX.charge、XXX は拡張子を除くファイル名、以下同様)について

電荷情報を原子名、元素記号、Mulliken 電荷、RESP 電荷、原子タイプ指定フラグ(s/j)、原子タイプの順に指定する。原子名、元素記号、Mulliken 電荷は必須とする。

C1 ^{†1}	C ^{†2}	0.7405 ^{†3}	0.780592 ^{†4}	s ^{†5} c ^{†6}
N2	N	-0.7807	-0.716801	s n
C3	C	-0.0909	-0.180378	j
C4	C	-0.2982	-0.106306	j
C5	C	0.0017	-0.108226	s ca

†1:原子名(必須)
†2:元素記号(必須)
†3:Mulliken 電荷(必須)
†4:RESP 電荷
†5:原子タイプ指定フラグ(s/j)

②結合情報ファイル(XXX.bond)について

結合情報を結合している原子の番号の組、結合距離、結合次数の順に指定する。この情報は全て必須とする。

1 ^{†1}	3 ^{†2}	1.5180 ^{†3}	0.8310 ^{†4}
1	11	1.2080	1.8100
1	12	1.3460	0.8820
2	3	1.4720	0.8860

†1:結合している原子の番号
†2:結合している原子の番号
†3:結合距離
†4:結合次数

③座標(Z-matrix)情報ファイル(XXX.zmat)について

Z-matrix 情報を以下のフォーマットで指定する。Z-matrix 情報ファイルは tplgeneL の実行に必須ではなく、このファイルがある場合には、トポロジーファイルの Z-matrix 情報を出力する部分にその値を反映する。

```

C
N 1 2.4455870
C 1 1.5183720 2 34.5282
C†1 3†2 1.5377660†3 1†4 112.3394†5 2†6 122.7222†7
C 4 1.5155030 3 117.6078 1 177.0822
C 5 1.4008330 4 123.5493 3 346.7479

```

†1: 元素記号
†2: 結合している原子の番号
†3: 結合している原子との原子間距離(Å)
†4: †2 と結合角をなす原子の番号
†5: 結合角(°)

2-1-2. Sybyl mol2 入力ファイル

tplgeneL は、一般的に使用される Sybyl mol2 ファイル形式に対応している。フォーマットについては以下の URL を参照の事。

<https://www.google.co.jp/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&uact=8&ved=0ahUKEwiexaWL88jSAhVoJFQKHTzXAaEQFggcMAA&url=http%3A%2F%2Fchemyang.cnu.edu.cn%2Fccb%2Fserver%2FAIMMS%2Fmol2.pdf&usg=AFQjCNFN-vkIArHr7OCFobSnKYshcTynlw>

mol2 ファイルの ATOM ブロック、BOND ブロックからそれぞれ以下の情報を取得する。

ATOM ブロック

- ・ 原子名
- ・ 座標
- ・ 原子タイプ
- ・ 電荷情報

BOND ブロック

- ・ 結合している原子の番号
- ・ 結合のタイプ

例) Sybyl mol2 ファイルの例

```

@<TRIPOS>MOLECULE
NH3.mol2
4 3 0 0 0
SMALL
NO_CHARGES

@<TRIPOS>ATOM

```

†1: 原子名
†2: カーテシアン座標
†3: 電荷
†4: 結合情報
†5: 結合のタイプ (1: 単結合、 2: 二重結合、 3: 三重結合、 ar: 芳香族結合)

1 N ^{†1}	<u>0.0530</u>	<u>0.0380</u>	<u>-0.1390</u> ^{†2}	N. 4	0 <1>	-0.9299 ^{†3}
2 H	-0.8360	-0.4780	-0.1390	H	0 <1>	0.3100
3 H	0.8360	-0.6290	-0.1390	H	0 <1>	0.3098
4 H	0.1070	0.6290	0.7000	H	0 <1>	0.3100

@<TRIPOS>BOND

1	<u>1</u>	<u>2</u> ^{†4}	<u>1</u> ^{†5}
2	1	3	1
3	1	4	1

※金属錯体における金属との結合の結合次数について

Hgene で tplgeneL 用の金属錯体の mol2 ファイルを作成する場合、金属と非金属間の結合の結合次数を nc(not connected)として出力する。tplgeneL 内では、nc 結合次数の結合を結合していないものとして処理を行う。

2-2. 原子タイプ割り当て基本情報取得

(1)原子タイプ、デフォルト原子タイプについて

cosgene で MD 計算を行う場合には分子内の各 atom、bond、angle、torsion、improper-torsion のパラメータを割り当てる必要がある。tplgeneL ではパラメータを割り当てる為の基本情報として、各原子の環境(元素名、結合の数、混成軌道のタイプ、結合している原子の環境、等)毎に原子タイプ、デフォルト原子タイプを割り当てている。

①原子タイプについて

tplgeneL では、AMBER General Amber Force Field(GAFF) 1.7、1.8、2.1、及び、AMBER parm99 力場に対応する原子タイプを使用している。

②デフォルト原子タイプについて

tplgeneL では、AMBER GAFF 1.7、1.8、2.1、AMBER parm99 力場で定義されていない原子タイプを定義する場合には、デフォルト原子タイプとして定義を行う。

また、原子タイプは定義されているものの、対応する結合、結合角、二面角、インプロパー二面角パラメータが存在しない場合には、デフォルト原子タイプについて定義されているデフォルトパラメータを使用する。そこで、デフォルト原子タイプの定義が必須となる。

tplgeneL プログラム内では、原子タイプとデフォルト原子タイプは対となっている必要があり、両者をセットとして登録する。

(2)原子タイプ割り当て基本情報取得

2-1 で取得した分子情報から、原子タイプを割り当てるための必要な情報を作成する。
原子タイプ割り当てに必要な情報は以下の通りである。

- ・結合のタイプ
- ・混成軌道のタイプ
- ・分子内の環構造の数、芳香環、脂環か否か

①結合のタイプの判別

入力分子の各結合の結合次数からその結合が単結合、芳香族結合、二重結合、三重結合かの判別を行う。

結合次数が 0.2 以上、1.2 未満の場合には、単結合と見なす。

結合次数が 1.2 以上、1.5 未満の場合には、芳香族結合と見なす。

結合次数が 1.5 以上、2.15 未満の場合には、二重結合と見なす。

結合次数が 2.15 以上の場合には、三重結合と見なす。

②混成軌道のタイプの判別

以下の表に従って混成軌道のタイプを取得する。ここでは、各原子の元素記号と結合の数、結合している原子の情報から混成軌道を判別する。

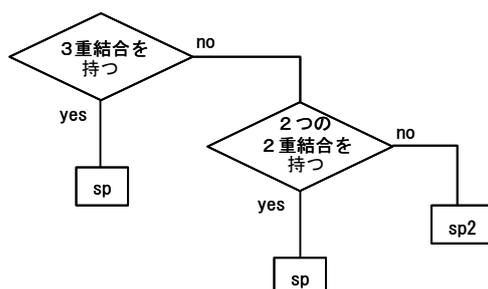
元素	結合の数	混成軌道のタイプ	元素	結合の数	混成軌道のタイプ
H	1	s	N	1	sp
C	1	sp		2	sp, sp2 ※1
	2	sp		3	sp2, sp3 ※2
	3	sp2		4	sp4
	4	sp3	P	2	sp2
O	1	sp2		3	sp3
	2	sp3		4	sp3
S	1	sp2	Ca	1	s
	2	sp3	F	1	s
	3	sp3	Cl	1	s
	4	sp3	Br	1	s

	I	1	s
--	---	---	---

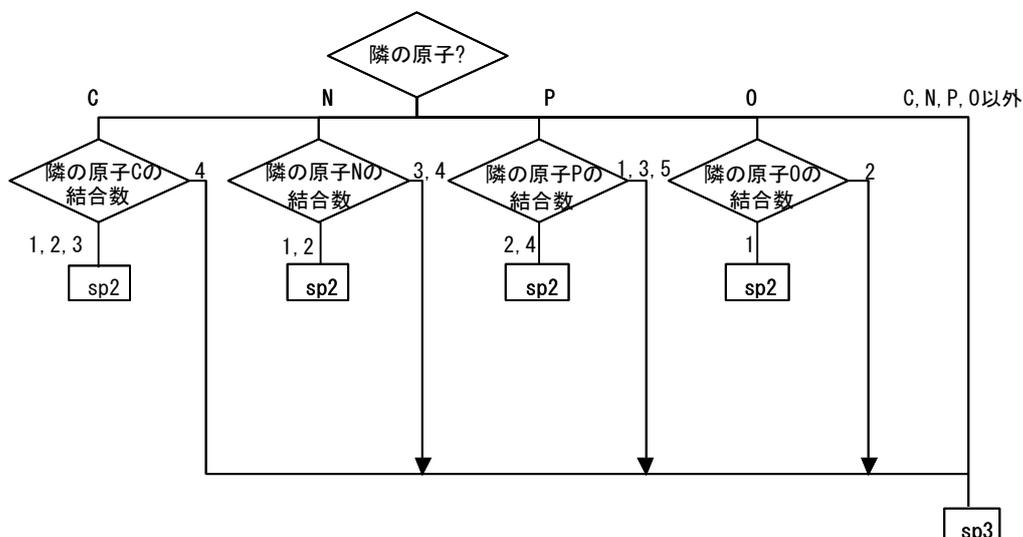
※N 原子の様に同じ結合の数でも複数の混成軌道のタイプを取る場合は、得られる混成軌道は化学的に必ずしも正確なものではない。

※1, 2 元素 N の結合の数が 2, 3 の場合以下の図に従って、混成軌道を判別する。

※1 元素 N の結合の数が 2 の場合



※2 元素 N の結合の数が 3 の場合



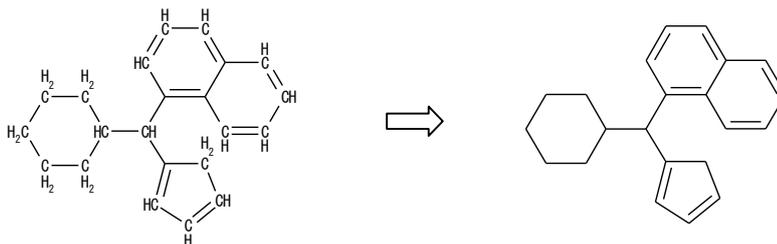
③分子内の環構造の数、芳香環、脂環のチェック

脂環、芳香環の判別は、環の判定、および、環構造内電子数のチェックの2段階で行う。

i. 環の判定について

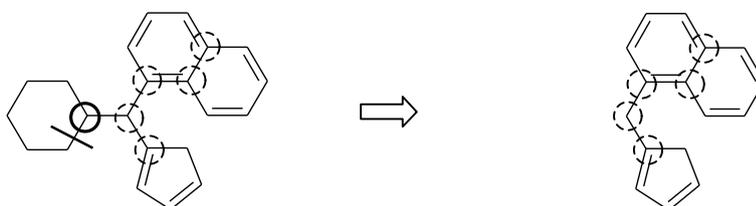
イ) 結合の数が 1 の原子の結合を切る。

この操作を切る結合がなくなるまで繰り返す。

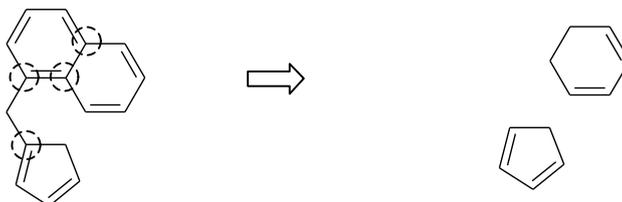


ロ) 結合の数が 3 の原子があった場合、その結合の 1 つを切る。

この操作によって結合の数が 1 になった原子についてイの操作を行う。



ハ) 結合の数が 3 の原子がなくなるまでロの操作を繰り返す。



ニ) 最後まで残った原子は環を構成しているので、その原子番号の組を保存する。

ホ) 元の分子からニで得られた原子を取り除き（ただし、複数の環内で共有している原子を除く）、すべての環構造が得られるまで、イ～ニの操作を繰り返す。

ii. 芳香族判定について

イ) 環を構成する原子の結合の数を数え、環内の原子毎に以下の規則により、その環にある二重結合に関りうる電子の数を数える。

炭素：1 電子

窒素：1 電子（結合の数が 2 本）、2 電子（結合の数が 3 本）

酸素：2 電子

硫黄：2 電子

ロ)イの規則に従って環内の電子の数を数えて $4n+2$ (n は整数) 個になったときは芳香族としてのフラグを立てる。ただし、環内に結合の数 3、 sp^2 の窒素がある場合、電子の合計が 7 になっても例外的に芳香族とみなす。

2-3. 分子トポロジー生成

2-1、2-2 で取得した情報をもとに以下の分子トポロジーを生成する。

- bond
- angle
- torsion
- improper-torsion

2-4. DB の読込

tplgenL では、各種 DB 情報を読み込む必要がある。各種 DB 情報を 1 つのファイルにまとめることで、ファイル I/O を削減し、高速化を図る。

各種 DB の情報は、1 つのファイル中に記載する。記載情報は、以下の 6 種類からなり、各情報の先頭に、「#####」+項目名を記載する。各情報の書式については、それぞれの後述の書式に従う。

原子タイプ割り当て規則情報	##### ATOMTYPE_PART
パラメータ(力場)情報	##### PARM_PART
フラグメント情報	##### FRGDB_PART
不足パラメータ動的補填用パラメータ情報(bond)	##### LACKBOND_PART
不足パラメータ動的補填用パラメータ情報(angle)	##### LACKANGLE_PART
nonbond パラメータ情報	##### NONBOND_PART

DB ファイルとして、以下の 4 種類のファイルを用意している。

amber99. db	AMBER parm99 力場用 DB ファイル
-------------	--------------------------

gaff17.db	AMBER GAFF 1.7 力場用 DB ファイル
gaff18.db	AMBER GAFF 1.8 力場用 DB ファイル
gaff21.db	AMBER GAFF 2.1 力場用 DB ファイル

2-4-1. 原子タイプ割り当て規則 DB 読み込み

原子タイプの規則を、プログラムを変更せずに対応する為に、原子タイプの割り当て規則を外部のファイルとして定義する。

各原子タイプ割り当て規則 DB には、以下の条件、及び、原子タイプを記述する。

指定できる条件：

- ・ 元素名(element)
- ・ 結合の数(nbond)
- ・ 混成軌道の種類(hybrid)：s、sp、sp²、sp³、(sp³d、sp³d² は未対応)
- ・ 結合している原子が、電子吸引性の原子と結合している数(nelectrwd)：
酸素原子、及び、窒素原子を電子吸引性原子とする。
- ・ 原子が所属する環のメンバ数(ring)：
着目原子が複数の環に所属する場合はの大きな環のメンバ数を指定する(ただし、6員環以下)。
- ・ 芳香族フラグ(aromatic)：その原子が芳香族原子ならば1、異なれば0を入れる。
- ・ 環構造フラグ(circ)：その原子が環に含まれるならば1、異なれば0を入れる。
- ・ 結合次数(border)

(1)原子タイプ割り当て規則 DB のファイルフォーマットについて

以下に原子タイプ割り当て規則 DB ファイルのフォーマットを示す。

①DB ファイルは begin で始まり end で終了するものとする。また、begin、end キーワードはファイル内に 1 組のみ記述するものとする。各条件は begin と end の間に記述するものとする。

例)

begin

各条件

.

```

.
.
end

```

②各条件は if から then の間に記述する。

各条件は以下に示す様に指定する。また、各条件は以下に示すキーワードのみ使用できる。

```
if "KEY" ("原子指定番号") "演算子" "VAL" then
```

例) 図 2-4-1 下線部①の例

```
if element(0) = N then
```

※原子指定番号とは、着目原子の周辺の原子を指定するための番号である。これを用いて着目している原子周辺の環境を指定することができる (図 2-4-2 参照)

条件キーワード)

キーワード "KEY"	説明	実際に入る 値 "VAL" の 例	対応 演算子	備考
element	元素名	C, N, ...	=	
hybrid	混成軌道	s, sp, sp2, sp3	=	現状対応しているのは s, sp, sp2, sp3 のみ
nbond	結合の数	1, 2, ...	=	
nelectrwd	電子吸引性の 原子に結合し ている数	1, 2, ...	=, <, >, <=, >=	
ring	原子が所属す る環のメンバ 数	5, 6, ...	=, <, >, <=, >=	
circ	環の一部か否 か	0 : 非環構 造 1 : 環構造	=	

aromatic	芳香族か否か	0 : 非芳香族	=	
		1 : 芳香族		
border	結合次数	1, 1.5, 2.0, ...	=, <, >, <=, >=	結合次数は量子化学計算値ではなく、単結合(1)、芳香族結合(1.5)、2重結合(2)、3重結合(3)を判別するために用いる

③条件文の中で、複数の条件を指定する事ができる。複数条件を指定する場合は、AND 条件（キーワード “and”）で記述する。OR 条件には対応しない。

（例：図 2-4-1 の下線部②）

④条件記述部は複数行にまたがっても良い。ただし、それぞれの条件式（例：element(0)=N）の途中での改行はできないものとする。

対応する例：

```
if element (0) = C and
    nbond(0) = 4 then
```

対応しない例：

```
if element(0) =
    C and nbond(0) = 4 then
```

⑤原子タイプ、デフォルト原子タイプの代入文は以下のフォーマットとする。ここで KEY は “atom_type”、又は、“default_atom_type” である。

“KEY” := “VAL” ;

例) 図 2-4-1 の下線部③の例

```
atom_type := ne;
```

キーワード)

原子タイプ : atom_type,

デフォルト原子タイプ : default_atom_type

- ⑥原子タイプ、デフォルト原子タイプは begin の直後、あるいは、if 文の直後に記述する。
右の例では太字部の if 文の意味がなくなるため、このような定義を許さないものとする。

正しい例)

```
if nbond(0) = 3 and hybrid(0) = sp3 then
  atom_type := n3;
  default_atom_type := 3n2;
  if element(02) = C then
    if element(021) = 0 and
      nbond(021) = 1 then
      atom_type := n;
      default_atom_type := 3n1;
    endif
  endif
endif
```

誤り例)

```
if nbond(0) = 3 and hybrid(0) = sp3 then
  if element(02) = C then
    if element(021) = 0 and
      nbond(021) = 1 then
      atom_type := n;
      default_atom_type := 3n1;
    endif
  endif
  atom_type := n3;
  default_atom_type := 3n2;
endif
```

- ⑦デフォルト原子タイプは結合の数、元素記号、数字の文字列で指定する。異なるデフォルト原子タイプを指定する際に、結合の数、元素記号が重複している場合には 3 番目の数字を重複しない数字で指定する (3n1、3n2、、、等)。

例) 結合の数 3 の窒素の例



デフォルト原子タイプ: 3n1

- ⑧デフォルト原子タイプは上位の条件で指定されていた場合、省略することができる。
図 2-4-1 でデフォルト原子タイプを省略した 11~13 行目のブロックに対して上位の条件である、10 行目のデフォルト原子タイプ 2n2 を採用する。

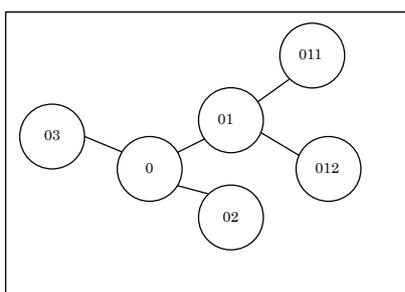
- ⑨ ‘!’ 以降のカラムはコメント行とする。

```

1   begin
2   if element(0) = N then①
3       if aromatic(0) = 0 then
4           if nbond(0) = 1 then
5               atom_type := n1;
6               default_atom_type := 1n1;
7           endif
8           if nbond(0) = 2 then
9               atom_type := n1;
10              default_atom_type := 2n2;
11              if hybrid(0) = sp2 then
12                  atom_type := n2;
13              endif
14              if border(01) = 2 and border(021) > 1.5 then②
15                  atom_type := ne;
16                  default_atom_type := 2n1;

```

図 2-4-1. 原子タイプ割り当て規則 DB ファイル例



0 : 着目原子
01, 02, 03 : 着目原子の隣の原子
011, 012 : 隣の隣の原子

図 2-4-2. 原子指定番号

(2)原子タイプ割り当て規則 DB の読み込み(中間情報の作成)

(1) のフォーマットで記述された割り当て規則は if 文の階層的な構造になっているため、プログラムで処理しやすい中間情報に変換し保存する。

中間情報の作成処理の流れ

①原子タイプ割り当て規則 DB の読み込み処理

if 文の階層的に記述された原子タイプ割り当て規則 DB を読み込み、構文木の作成を行う。

②原子タイプ毎の条件の結合処理

①で作成した構文木をもとに、原子タイプ毎に条件を結合し、一次元的な情報に変換し保存する。

③原子指定番号毎の条件のグループ化処理

原子タイプ毎に結合した、各条件を各原子指定番号（着目原子、隣、その隣の原子など）毎に整理して保存する。

以下にそれぞれの処理を説明する。

①原子タイプ割り当て規則 DB の読み込み処理

ファイルの内容を順次解釈し、各 if 文の情報を構造体 PRMIfNode に保存する。構造体 PRMIfNode は、if ポインタ、then ポインタ、条件保存部、原子タイプ部で構成する(図 2-4-3 参照)。

if 文の情報を保存した構造体群を、以下に示す処理によりポインタで結合し構文木を作成する(図 2-4-4 参照)。

【構文木作成処理】

イ) if から then の間に記述された条件を、構造体 PRMIfNode の条件保存部に保存する。
(root の場合はこの処理は行わない)

ロ) ファイル内に以下のキーワードがある場合に、そのキーワード毎に以下の処理を行う。

<atom_type, default_atom_type の場合>

原子タイプ、デフォルト原子タイプを保存し、②の処理を繰り返す。

<if の場合>

(i) 新しい条件を保存する構造体 PRMIfNode を生成し、以下のようにつなぐ。

a) 参照中の構造体の then ポインタが null の場合、参照中の構造体の then ポインタにつなぐ。

b) 参照中の構造体の then ポインタが null でない場合、then ポインタにつながっている（一つ下の階層の）構造体の if ポインタをたどり、一番最後（if ポインタが null）の構造体の if ポインタにつなぐ。

(ii) 新しく作成した構造体を参照するようにセットし、再帰的に本処理を呼び出す。

(i), (ii) の処理終了後、②の処理を繰り返す。

<end, endif の場合>

root の場合は“end”、それ以外の場合は“endif” キーワードが現れた場合、この処

理を終了する。



図 2 - 4 - 3. 構造体 PRMIfNode

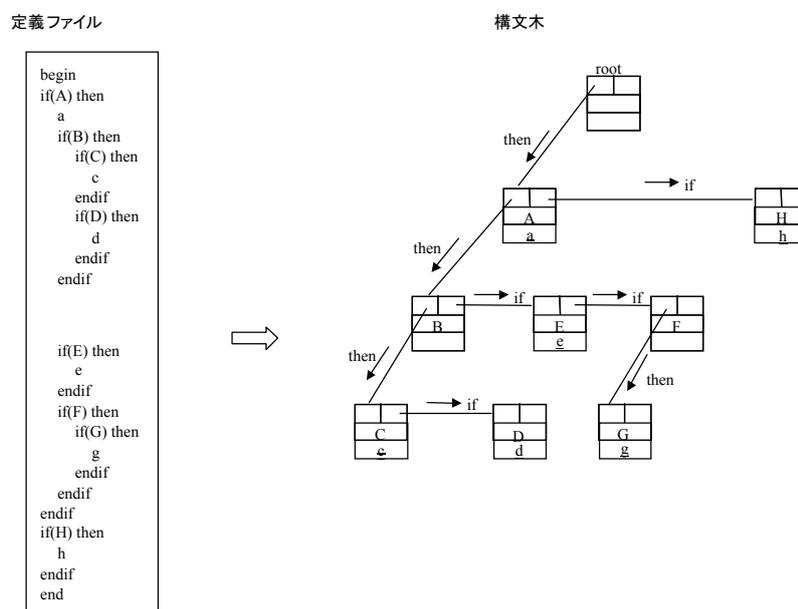


図 2 - 4 - 4. 構文木の作成

②原子タイプ毎の条件の結合処理

作成した構文木をもとに以下の処理を行い、原子タイプ毎の条件を結合する。

【原子タイプ毎の条件の結合処理】

イ) 条件とデフォルト原子タイプを配列に保存する。

ロ) 参照している構造体 PRMIfNode に原子タイプが保存されてる場合、配列の内容(これまで保存してきた条件群、及び、デフォルト原子タイプ)と原子タイプもとに、(3)の原子指定番号毎の条件のグループ化処理を行う。

ハ) then ポインタが null で無い場合、then ポインタに繋がっている条件に対して再帰的

に本処理を呼び出す。

ニ)自分自身の条件を配列から削除する。

ホ)if ポインタが null で無い場合、if ポインタに繋がっている条件に対して再帰的に本処理を呼び出す。

③原子指定番号毎の条件のグループ化処理

②の処理によって、原子タイプ毎に結合した条件のグループ化を行う。条件のグループ化は if 毎に作成する構造体 PRMIfFrame と、各 if 文内の各条件の原子指定番号毎に作成する構造体 PRMAAtomCondition の 2 つの構造体を用いる。構造体 PRMIfFrame は構造体 PRMAAtomIfFrame へのポインタ、原子タイプ、次の if 文(構造体 PRMIfFrame)へのポインタからなる。構造体 PRMAAtomCondition は原子指定番号毎の条件保存部からなる。

原子タイプを if 文の骨格用構造体 PRMIfFrame (図 2-4-5) に保存する。各 if 文中の条件を各原子指定番号 (着目原子、隣、その隣の原子など) 毎に整理して原子指定毎条件の条件を保存する構造体 PRMAAtomCondition (図 2-4-5) に保存する。

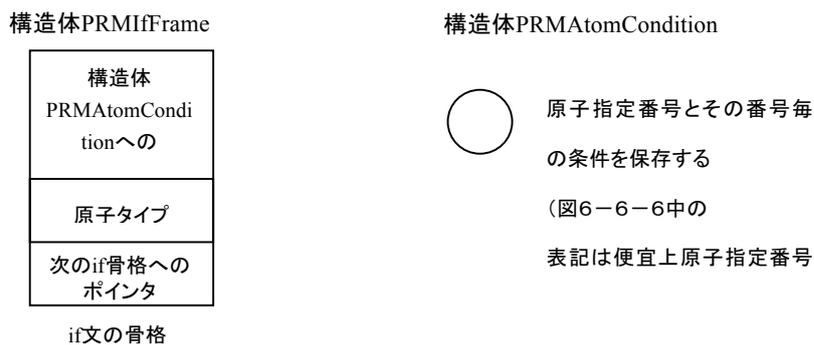


図 2-4-5. 構造体 PRMIfFrame と構造体 PRMAAtomCondition

以下の処理を行い、原子タイプ毎に結合した条件を各原子指定番号毎にグループ化し、図 2-4-6 のような構造に保存する。

【原子指定番号毎の条件のグループ化処理】

イ) if 文の骨格用構造体 PRMIfFrame を生成し、原子タイプ、デフォルト原子タイプを保存する。

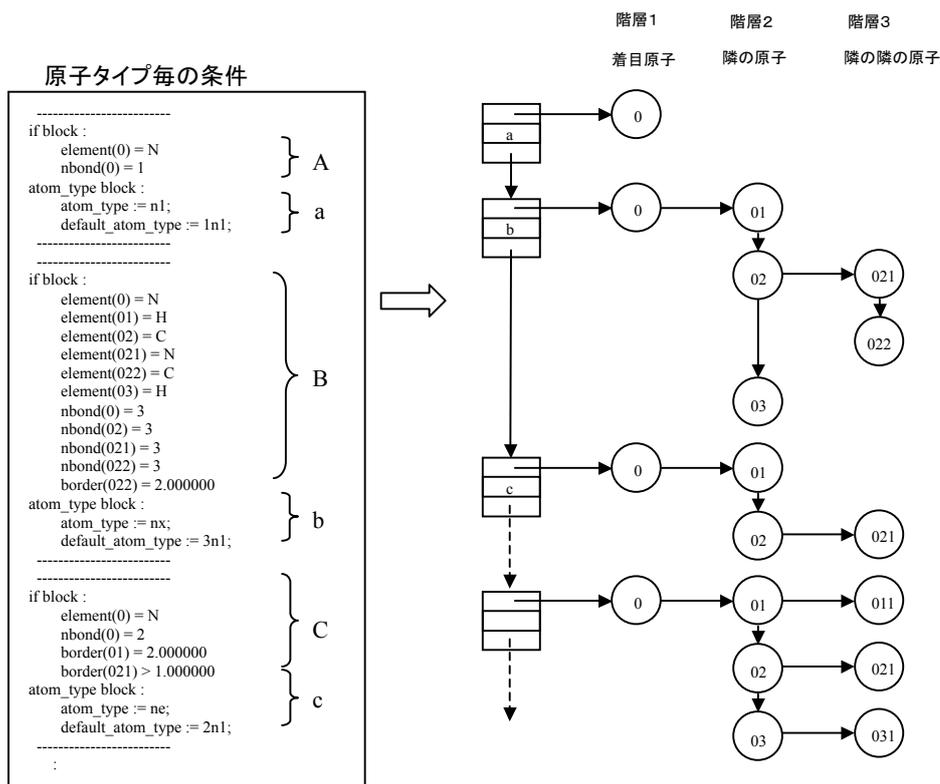
ロ) 各条件に対して、以下のように構造体を生成し、原子指定番号毎の条件を保存する。

(i) 原子指定番号が if ブロック内で新規の場合、

原子指定番号毎の条件を保存する構造体 PRMAAtomCondition を生成、条件を保存する。

- a) 上位の（原子指定番号の末尾を1つ除いた）構造体に、生成した構造体と同じ階層の構造体がつながっていない場合、上位の構造体と生成した構造体をつなぐ。
 - b) 上位の構造体に、生成した構造体と同じ階層^(注1)の構造体が既につながっている場合、同じ階層の構造体の末尾と生成した構造体をつなぐ
この際、生成した構造体より上の階層の構造体が無かった場合、その上位の構造体も生成する。
- (ii) 原子指定番号が if 文の条件内で既出の場合、新たに構造体を生成せず、原子指定番号が一致する構造体に条件を保存する。

注1) 階層とは着目原子からの位置関係を示し、上の階層とは参照している原子より着目原子に近い原子、下の階層とは参照している原子より着目原子から遠い原子を指す。



英大文字：条件
英小文字：原子タイプ

図 2-4-6. 各条件のグループ化

2-4-2. パラメータ DB 読み込み

各パラメータを読み込む。

- atom パラメータ
- bond パラメータ
- angle パラメータ
- torsion パラメータ
- improper-torsion パラメータ

(1) パラメータ DB のファイルフォーマットについて

以下にパラメータ DB ファイル例とフォーマットを示す。

パラメータ DB は以下の各種データブロックに分けて記述する。各ブロックは Start ブロック名で始まり、end ブロック名で終了する。

ブロック名	意味
atom	フラグメント内の atom パラメータを記述
bond	フラグメント内の bond パラメータを記述
angle	フラグメント内の angle パラメータを記述
torsion	フラグメント内の torsion パラメータを記述
improper	フラグメント内の improper-torsion のパラメータを記述

フォーマット)

Start ブロック名

end ブロック名

例)

Start atom

:

end atom

Start bond

:

end bond

:

①各種ブロック共通フォーマット

- 各パラメータは、“,” で区切り、複数のパラメータを一行で記述することもできる。
- “;” 以降をコメント行とする。

②atom ブロック

atom ブロックで指定できるキーワードは以下の通りである。

キーワード	説明	実際の値の例
atomtype	原子タイプ	ca, na, ...
mass	原子の質量	12.011
rvdw	原子半径	1.908
evdw	電荷	0.086
level	パラメータのレベル	[rhf/6-31G*], ...
atom	元素名	C, N, ...
com	混成軌道の種類	s, sp, sp2, ...
nbond	結合の数	3, 4, ...
bond(n, atom) ※	隣の原子の元素名	C, N, [C, N] ...
bond(n, com) ※	隣の原子の混成軌道の種類	s, sp, sp2, ...

※ カッコ内の n は最大の結合の数までの通し番号

例)

```

Start atom
  atomtype= ca ,mass= 12.01000 ,
  rvdw= 1.908000 ,evdw= 0.0860000,
  level=[rhf/6-31G*],; from AMBER gaff
  atom= C ,
  com= sp2 ,
  nbond= 3 ,
  bond(1,atom)= [C,N] , bond(1,com)= sp2,
  bond(2,atom)= [C,N] , bond(2,com)= sp2,
  bond(3,atom)= x ,
end atom

```

③bond ブロック

bond ブロックで指定できるキーワードは以下の通りである。

キーワード	説明	実際の値の例
atomtype(1)	結合している原子 1 の原子タイプ	ca, na, ...
atomtype(2)	結合している原子 2 原子タイプ	ca, na, ...
order(1,2)	結合次数の範囲	[1.7 < 3.0)※ ⇒ 1.7 ≤ 結合次数 < 3.0
K	バネ定数	473.7
Req	平衡結合距離	1.39

※結合次数の範囲を指定は以下を用いて行う。

下限 : “(” 境界を含まない

“[” 境界を含む

上限と下限の区切り文字 : “<” (固定)

“>” (未対応)

上限 : “)” 境界を含まない

“]” 境界を含む

例)

```
Start bond
  K= 570.000 ,
  Req= 1.229,
  atomtype(1)= 1o1, atomtype(2)= 3c1,
  order(1,2)=[1.7 < 3.0 ), ; double bond C=O
end bond
```

④angle ブロック

angle ブロックで指定できるキーワードは以下の通りである。

キーワード	説明	実際の値の例
atomtype(1)	結合角をなす原子 1 の原子 タイプ	ca, na, ...
atomtype(2)	結合角をなす原子 2 の原子 タイプ (結合角の中心)	ca, na, ...
atomtype(3)	結合角をなす原子 3 の原子 タイプ	ca, na, ...
K	バネ定数	63
Req	平行結合角	120

例)

```

Start angle
  K=    63.000 ,
  Req=  120.000 ,
  atomtype(1)= ca, atomno(2)=ca, atomno(3)= ca,
end   angle

```

⑤torsion ブロック

torsion ブロックで指定できるキーワードは以下の通りである。

キーワード	説明	実際の値の例
atomtype(1)	二面角をなす原子 1 の原子タイプ	ca, na, ...
atomtype(2)	二面角をなす原子 2 の原子タイプ	ca, na, ...
atomtype(3)	二面角をなす原子 3 の原子タイプ	ca, na, ...
atomtype(4)	二面角をなす原子 4 の原子タイプ	ca, na, ...
order(2,3)	atomtype(2), atomtype(3) 間の結合次数の範囲	[1.7 < 3.0)※1 ⇒1.7 ≤ 結合次数 < 3.0
no	二面角パラメータの数	1, 2, ...
pn(n) ※2	回転周期	2
phase(n) ※2	位相	180
pk(n) ※2	バリアー高	12
idivf(n) ※2	割る値	2

※1 結合次数の範囲を指定は以下を用いて行う。

下限 : “(” 境界を含まない

“[” 境界を含む

上限と下限の区切り文字 : “<” (固定)

“>” (未対応)

上限 : “)” 境界を含まない

“]” 境界を含む

※2 カッコ内の n は torsion パラメータの通し番号

例)

```

Start torsion
  no= 1 ,
    pn( 1)= 2 ,
    phase( 1)= 180.000 ,
    pk( 1)= 26.600 ,
    idivf( 1)= 4 ,
    !
  atomtype(1)= X , atomtype(2)= c2, atomtype(3)= c2, atomtype(4)= X ,
  order(2,3)=[1.5 < 3.0), ; double bond
end torsion

```

⑥improper ブロック

improper ブロックで指定できるキーワードは以下の通りである。

キーワード	説明	実際の値の例
atomtype(1)	インプロパー二面角をなす原子 1 の 原子タイプ	ca, na, ...
atomtype(2)	インプロパー二面角をなす原子 2 の 原子タイプ	ca, na, ...
atomtype(3)	インプロパー二面角をなす原子 3 の 原子タイプ (インプロパー二面角の中心)	ca, na, ...
atomtype(4)	インプロパー二面角をなす原子 4 の 原子タイプ	ca, na, ...
no	インプロパー二面角パラメータの数	1, 2, ...
pn(n) ※	回転周期	2
phase(n) ※	位相	180
pk(n) ※	バリアー高	12
idivf(n) ※	割る値	2

※ カッコ内の n は improper パラメータの
通し番号

例)

```

Start improper
  no= 1 ,
    pn( 1)= 2 ,
    phase( 1)= 180.000 ,
    pk( 1)= 1.100 ,
    idivf( 1)= 1 ,
  !
  atomtype(1)= na, atomtype(2)= ca, atomtype(3)= ca, atomtype(4)= c3 ,
end improper

```

2-4-3. フラグメント DB 読み込み

フラグメント DB とは、2-5 のアルゴリズムで原子タイプの割り当てができないものや、ユーザの定義したパラメータを使用したい低分子の官能基等を、それぞれ低分子のフラグメントとみなし、各種パラメータを登録した DB である。このフラグメント DB に登録してあるフラグメントと一致するパターンを計算対象分子内から見つけ、各種パラメータを割り当てる。

ここではフラグメント DB に定義されたフラグメントの以下の情報を読み込む。

- atom パラメータ
- bond パラメータ
- angle パラメータ
- torsion パラメータ
- improper-torsion パラメータ

(1) フラグメント DB のファイルフォーマットについて

以下にフラグメント DB ファイル例とフォーマットを示す。

フラグメント DB は以下の各種データブロックに分けて記述する。各ブロックは Start ブロック名で始まり、end ブロック名で終了する。

ブロック名	意味
fragment	各フラグメントの情報を記述
atom	フラグメント内の原子のパラメータを記述
bond	フラグメント内の結合のパラメータを記述
angle	フラグメント内の結合角のパラメータを記述
torsion	フラグメント内の二面角のパラメータを記述
improper	フラグメント内のインプロパー二面角のパラメータを記述

フォーマット)

Start ブロック名

end ブロック名

例)

Start fragment

:

Start atom

:

end atom

:

end fragment

①各種ブロック共通フォーマット

- 各パラメータは、“,” で区切られ、複数のパラメータを一行で記述することもできる。
- “;” 以降をコメント行とする。

②fragment ブロック

fragment ブロックで指定できるキーワードは以下の通りである。

キーワード	説明	実際の値の例
Fragment	フラグメント名	Benzene 等
ID	フラグメントの ID	1, 2, ...

また、fragment ブロック内には以下のブロックを含む。(※は必須)

atom ブロック (※)

bond ブロック (※)

angle ブロック

torsion ブロック

improper ブロック

```

例)      Start fragment
          fragment= Benzene, ID=1,
          !
          Start atom
            atomtype= ca ,mass= 12.01000 ,
            rvdw= 1.908000 ,evdw= 0.0860,
            atomno=1,
            atom= C,
            nbond= 3,
          end  atom
          :
          Start bond
            K= 473.700 ,
            Req= 1.3900,
            atomno(1)= 1 ,atomno(2)=2,
          end  bond
          :
          end fragment
  
```

③atom ブロック

atom ブロックで指定できるキーワードは以下の通りである。atom ブロックは fragment ブロック内に記述されなければならない。

キーワード	説明	実際の値の例
atomtype	原子タイプ	ca, na, ...
mass	原子の質量	12.011
rvdw	原子半径	1.908
evdw	電荷	0.086
atomno	原子の番号	1, 2, ...
atom	元素名	C, N, ...
nbond	結合の数	3, 4, ...

なお、フラグメントと入力分子構造のパターンマッチの条件として、元素名(atom)と結合の数(nbond)を用いる。元素名をパターンマッチの条件として使用したくない場合は、ワイルドカード X で指定する(atom=X)。また、結合の数をパターンマッチの条件として使用したくない場合は、nbond の項目を指定しない。

例)

```
Start atom
  atomtype= ca ,mass= 12.01000 ,
  rvdw= 1.908000 ,evdw= 0.0860,
  atomno=1,
  atom= C,
  nbond= 3,
end atom
```

④bond ブロック

bond ブロックで指定できるキーワードは以下の通りである。bond ブロックは fragment ブロック内に記述されなければならない。

キーワード	説明	実際の値の例
atomno (1)	結合している原子 1 の番号	1, 2, ...
atomno (2)	結合している原子 2 の番号	1, 2, ...
order (1, 2)	結合次数の範囲	[1.7 < 3.0)※ ⇒ 1.7 ≤ 結合次数 < 3.0
K	バネ定数	473.7
Req	平衡結合距離	1.39

※結合次数の範囲を指定は以下を用いて行う。

下限 : “(” 境界を含まない
“[” 境界を含む

キーワード	説明	実際の値の例
atomno(1)	二面角をなす原子 1 の番号	1, 2, ...
atomno(2)	二面角をなす原子 2 の番号	1, 2, ...
atomno(3)	二面角をなす原子 3 の番号	1, 2, ...
atomno(4)	二面角をなす原子 4 の番号	1, 2, ...
no	二面角パラメータの数	1, 2, ...
pn(n) ※	回転周期	2
phase(n) ※	位相	180
pk(n) ※	バリアー高	12
idivf(n) ※	割る値	2

例)

```

Start torsion
  no= 1 ,
    pn( 1)= 2 ,
    phase( 1)= 180.000 ,
    pk( 1)= 5.000 , ※ カッコ内の n は torsion パ
    idivf( 1)= 2 ,      ラメータの通し番号
    !
  atomno(1)= 1 , atomno(2)=2, atomno(3)=3, atomno(4)= 4,
end  torsion

```

⑦improper ブロック

improper ブロックで指定できるキーワードは以下の通りである。improper ブロックは fragment ブロック内に記述されなければならない。

キーワード	説明	実際の値の例
atomno(1)	インプロパー二面角をなす原子 1 の番号	1, 2, ...
atomno(2)	インプロパー二面角をなす原子 2 の番号	1, 2, ...
atomno(3)	インプロパー二面角をなす原子 3 の番号 (インプロパー二面角の中心)	1, 2, ...
atomno(4)	インプロパー二面角をなす原子 4 の番号	1, 2, ...
no	インプロパー二面角パラメータの数	1, 2, ...
pn(n) ※	回転周期	2
phase(n) ※	位相	180
pk(n) ※	バリアー高	12
idivf(n) ※	割る値	2

※ カッコ内の n は improper
パラメータの通し番号

例)

```

Start improper
  no= 1 ,
    pn( 1)= 2 ,
    phase( 1)= 180.000 ,
    pk( 1)= 1.100 ,
    idivf( 1)= 1 ,
    !
  atomno(1)= 1 ,atomno(2)= 2 ,atomno(3)=3,atomno(4)= 4,
end improper

```

2-4-4. 不足パラメータ動的補填用パラメータ情報

計算時に「不足パラメータを計算する」を選択した場合に不足パラメータの動的補填を行う。ここでは入力構造の原子種、結合長、結合角の各値を使用して平衡結合長、平衡結合角、力の定数の計算を行う。

計算方法については、「2-7. (2)パラメータの動的計算による補填」に記述する。

①結合パラメータの補填用パラメータ

結合パラメータの補填用パラメータは以下の書式で記述する。

元素の組		
i	j	Kij
%s	%s	%lf

②結合角パラメータの補填用パラメータ

結合各パラメータの補填用パラメータは以下の書式で記述する。

元素	C	Z
%s	%s	%lf

2-4-5. nonbond パラメータ情報

以下に nonbond 情報 DB ファイル例とフォーマットを示す。

nonbond 情報 DB ファイルは以下の 2 つブロックに分けて記述する。

①FUNCTIONS ブロック

非共有結合相互作用を計算する関数を記述する。以下のいずれかを記述する。

LENNARD-JONES-AMBER

H-BONDING-AMBER

②NONBONDS ブロック

非共有結合相互作用を計算する際に用いるパラメータを記述する。

①FUNCTIONS ブロック

FUNCTIONS ブロックとは、PRE> FUNCTIONS から PRE> NONBONDS の前の行までを指す。

このブロックに記述される情報は以下の通りである。

イ)非共有結合相互作用を計算する関数

ロ)原子タイプと原子タイプ番号 (非共有結合のパラメータの割り当てに用いる) の
対応表

イ)非共有結合を計算する関数

非共有結合相互作用を計算する関数名、パラメータの数を指定する。

PRE> FUNCTIONS の直後の行に関数名を以下のフォーマットで指定する。

また、“;”以降はコメント行とする。

フォーマット)

関数番号	この関数で使用する パラメータ総数	空白	関数名
%6d	%6d	6	%40s

例)

PRE> FUNCTIONS

;NONBONDED-POTENTIALS-FOR-PREPARATION

1 4 LENNARD-JONES-AMBER

; (R*-AND-E)

ロ)原子タイプと原子タイプ番号の対応表

イの“非共有結合を計算する関数”以降の行の“; TYPE OF ATOMS”から PRE> NONBONDS の間に指定する。フォーマットは以下の通りで“;”以降に記述する。

(※nonbond 情報 DB ファイルにおいて、通常“;”はコメントであるが、“; TYPE OF ATOMS”以降のコメント行で原子タイプと原子タイプ番号の対応表を示す。この情報は必須である)

フォーマット)

; TYPE OF ATOMS

; 原子タイプ 1, 原子タイプ 2, 原子タイプ 2 : 原子タイプ番号

例)

; TYPE OF ATOMS

; c, c*, ca, cb, cc, cd, ck, cm, cn, cq, cr, cv, cw, cx, cy, cz, c1, c2 : 1

; c3, 4c1 : 2

; h : 3

上記の例は以下を表す。

原子タイプ c, c*, ca, …の原子タイプ番号は 1

原子タイプ c3, 4c1 の原子タイプ番号は 2

原子タイプ h の原子タイプ番号は 3

②NONBONDS ブロック

NONBONDS ブロックとは、PRE> NONBONDS からファイルの終端までを指す。

このブロックには原子タイプ番号と非共有結合相互作用計算時のパラメータの対応を記述する。

tplgeneL で対応する AMBER parm99、GAFF 1.7、1.8、2.1 では、非共有結合相互作用の計算に必要なパラメータは以下のとおりである。

- ・ 非共有結合を決める原子タイプ番号 i
- ・ 関数番号 (FUNCTIONS ブロックで指定した関数の番号を指定する)
- ・ van der Waals エネルギーのための原子半径 ri
- ・ van der Waals エネルギーの深さの値 ei
- 1-4 van der Waals エネルギーのための定数 RVi
- 1-4 静電相互作用エネルギーのための定数 REj

上記パラメータを以下のフォーマットで記述する。

フォーマット)

原子タイプ番号 i	原子タイプ番号 j	関数タイプ番号	ri	ei	REij	RVij
%6d	%6d	%3d	%10.5lf	%11.6	%12.7	%8.3lf

例)

PRE> NONBONDS

;NUMBER OF TYPE= 40

```
1 0 1 1.90800 0.086000 0.8333333 0.500; c
2 0 1 1.90800 0.109400 0.8333333 0.500; c3
3 0 1 0.60000 0.015700 0.8333333 0.500; h
4 0 1 0.00000 0.000000 0.8333333 0.500; ho
```

2-5. 原子タイプ割り当て

2-2 で取得した、入力分子内の各原子の基本情報（元素名、結合の数、混成軌道の種類など）と、2-4 でグループ化、保存した原子タイプの定義情報（図 2-4-6 参照）とを比較する。原子指定番号毎の各条件 (PRMAtomCondition) が全て一致した場合、if 文の骨格用構造体 (PRMIFFrame) に保存している原子タイプを割り当てる。また、複数の原子タイプの定義情報と一致する場合は、後の方の原子タイプを上書きして割り当てる。

(1) 原子タイプ割り当て条件の比較

原子指定番号毎の条件の評価は以下の処理で行い、返り値として TRUE が返ってきた場合には、if 文の骨格用構造体に保存されている原子タイプ、デフォルト原子タイプを割り当てる。FALSE の場合には、次の if 文の条件について同様に評価する。

【原子タイプ割り当て処理】

- ① 指定された原子指定番号の条件 (元素名、結合の数など) が参照している原子の情報と、
- (i) 一致しない場合、
FALSE を呼び出し元関数に返す。
 - (ii) 一致し、かつ、指定された原子指定番号より下の階層 (注 1) の条件が無い場合、
TRUE を呼び出し元関数に返す。
 - (iii) 一致するが、指定された原子指定番号より下の階層の条件がある場合、
参照している原子に結合している隣の原子について、本関数を再帰的に呼び出す。
下の階層の条件全てを満たす (TRUE を返す) 隣の原子の組み合わせが得られた場合、
TRUE を呼び出し元関数に返す
下の階層の条件全てを満たす隣の原子の組み合わせが得られ無かった場合、
FALSE を呼び出し元関数に返す

注 1) 階層とは着目原子からの距離を示し、上の階層とは参照している原子より着目原子に近い原子、下の階層とは参照している原子より着目原子から遠い原子を指す。

2-6. パラメータ割り当て

2-5 で割り当てた原子タイプをもとに以下のパラメータを割り当てる。また、パラメータ DB ファイル内の各パラメータの項目に結合次数が指定されている場合は、結合次数がその範囲を満たすときのみ、そのパラメータを割り当てる。

- atom パラメータ
- bond パラメータ
- angle パラメータ
- torsion パラメータ
- improper-torsion パラメータ
- nonbond パラメータ

パラメータ DB 内に対応するパラメータが存在しない場合には、以下の 2 種類のいずれかの方法について不足パラメータの補填を行なう。

- デフォルトパラメータを用いてのパラメータ補填
- パラメータの動的計算による補填(動的補填は結合、結合角パラメータのみ対応)

以下に各補填方法について示す。

(1) デフォルトパラメータを用いてのパラメータ補填

デフォルトパラメータとは、元素名と結合の数、混成軌道の種類で分類し、統計的に求めたパラメータであり、基本的なものは既にパラメータ DB ファイル内に登録されている。

計算時に「デフォルトパラメータを使用する」を選択した場合にこれらのパラメータを使用してトポロジーファイルを作成する。

(2) パラメータの動的計算による補填

計算時に「不足パラメータを計算する」を選択した場合に不足パラメータの動的補填を行う。ここでは入力構造の原子種、結合長、結合角の各値を使用して平衡結合長、平衡結合角、力の定数の計算を行う。

パラメータの動的補填は、結合パラメータ(平衡結合長、力の定数)、及び、結合角パラメータ(平衡結合角、力の定数)について、行う。

① 結合パラメータの補填について

結合パラメータ(力の定数)の補填は以下の式に従って計算を行う。

$$K_r = K_{ij} \left(\frac{1}{r_{ij}} \right)^m$$

ここで、mは4.5を使用する。rijは入力構造から得られる結合長の値を、Kijは下表に示す各原子の組に対応する値を使用する。Kijはbond.prmファイル内の情報を使用する。また、平衡結合長は、入力構造の結合長を使用する。

②結合角パラメータの補填について

結合角パラメータ(力の定数)の補填は以下の式を用いて計算を行う。

$$K_{ijk}^0 = 143.9 Z_i C_j Z_k (r_{ij}^{eq} + r_{jk}^{eq})^{-1} (\theta_{ijk}^{eq})^{-2} \exp(-2D)$$

$$D = \frac{(r_{ij}^{eq} - r_{jk}^{eq})^2}{(r_{ij}^{eq} + r_{jk}^{eq})^2}$$

ここで、 r_{ij}^{eq} 、 r_{jk}^{eq} は入力構造から得られる結合長の値を使用する。 θ_{ijk}^{eq} は入力構造から得られる結合角の値を使用する。C及びZは下表に示す対応する値を使用する。C及びZはangle.prmファイル内の情報を使用する。

また、平衡結合角は入力構造の結合角を使用する。

参考論文

Wang et al. J Comput Chem 2004, 25, 1157

表. 結合伸縮に関する力の定数を見積もる為のパラメータ一覧

No.	i	j	hK_{ij}	No.	i	j	hK_{ij}
1	H	H	4.661	27	C	S	8.117
2	C	C	7.643	28	N	O	7.526
3	N	N	7.634	29	N	F	7.475
4	O	O	7.561	30	N	Cl	8.266
5	F	F	7.358	31	N	Br	8.593
6	Cl	Cl	8.648	32	N	I	8.963
7	Br	Br	9.012	33	N	P	8.212
8	I	I	9.511	34	N	S	8.073
9	P	P	8.805	35	O	F	7.375
10	S	S	8.316	36	O	Cl	8.097
11	H	C	6.217	37	O	Br	8.276
12	H	N	6.057	38	O	I	8.854
13	H	O	5.794	39	O	P	7.957
14	H	F	5.6	40	O	S	7.922
15	H	Cl	6.937	41	F	Cl	7.947
16	H	Br	7.301	42	Cl	I	9.309
17	H	I	7.802	43	Br	I	9.38
18	H	P	7.257	44	F	P	7.592
19	H	S	7.018	45	F	S	7.733
20	C	N	7.504	46	Cl	P	8.656
21	C	O	7.347	47	Cl	S	8.619
22	C	F	7.227	48	Br	P	8.729
23	C	Cl	8.241	49	Br	S	8.728
24	C	Br	8.478	50	I	P	9.058
25	C	I	8.859	51	I	S	9.161
26	C	P	8.237	52	P	S	8.465

表. 結合角の bend に関する力の定数を見積もる為のパラメータ一覧

Element	C	Z
H	-	0.784
C	1.339	1.183
N	1.300	1.212
O	1.249	1.219
F	-	1.166
Cl	-	1.272
Br	-	1.378
I	-	1.398
P	0.906	1.620
S	1.448	1.280

(3) 二面角パラメータの補填

計算時に「不足パラメータを計算する」を選択した場合、二面角の不足パラメータの補填を行う。

二面角のパラメータは、二面角を生成する 4 原子(図参照)のうち、内側に位置する 2 原子(j、k)の結合数を使用し、以下の表に従い取得する。

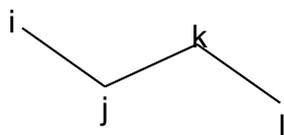


図. 二面角を生成する 4 原子

結合数j	結合数k	[※1]	[※2]	[※3]	[※4]
4	4	1.4	9	3	0.0
4	3	0.0	6	3	0.0
3	4	0.0	6	3	0.0
3	3	10.0	4	2	180.0
4	2	1.0	3	3	0.0
2	4	1.0	3	3	0.0
3	2	1.80	2	2	180.0
2	3	1.80	2	2	180.0
2	2	0.0	1	3	0.0

表. 原子 j、k の結合数と各パラメータの関係

※1) 力の定数

※2) 同一の共有結合の周りにおける内部回転角の総数

※3) 回転対称数

※4) 位相

2-7. フラグメント DB パラメータ割り当て

(1) パターンマッチアルゴリズム

フラグメント DB に登録されたフラグメントの構成元素名、結合情報、結合次数 (※)、結合の数 (※)、環上に含まれるか否かを示すフラグ (便宜的に環フラグとする) (※) をもとにパターンマッチ判定を行う。

(※は必須項目ではない。フラグメント DB 内で定義されている場合のみ、判定条件に加える。)

以下の手順で各フラグメントに対するパターンマッチを行う。

例として、以下の構造をフラグメントに登録した際の、パターンマッチ判定の流れを示す。

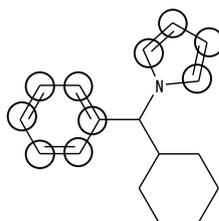


- ・ベンゼンの環構造のみ (H は登録していない)
- ・各原子の結合の数 3

① 計算対象分子から、フラグメントの最初に定義されている原子の元素名と環フラグと結合の数が一致する原子を探し、その原子をフラグメントとの一致候補原子とする。



フラグメント

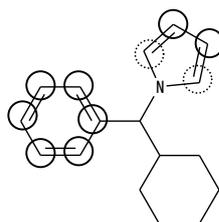


計算対象分子

② 着目原子 (○) と結合している原子の元素名、環フラグ、結合の数、結合次数がフラグメントと一致しない候補原子団を一致候補からはずす。



フラグメント



計算対象分子

- ③フラグメント内の全ての構成原子をチェックし終わるまで、着目原子をその原子の結合している次の原子に移し、②の操作を行う。
- ④フラグメント内の全て構成原子と一致するパターンが計算対象分子内に見つかった場合、フラグメント DB に登録されているパラメータを割り当てる。

(2) パターンのマッチしたフラグメントのパラメータ割り当て

(1)でパターンのマッチしたフラグメントにフラグメント DB で定義された以下のパラメータを割り当てる。定義されていないパラメータについては割り当てない。

- atom パラメータ
- bond パラメータ
- angle パラメータ
- torsion パラメータ
- improper-torsion パラメータ

2-8. トポロジーファイル出力

作成したトポロジー情報を出力する。トポロジーファイルは以下の項目を含む。

bond、angle、torsion、improper-torsion 項において、デフォルトパラメータ、または、動的補填パラメータが記述されている場合には、その項目のコメント(以降の部分)にアスタリスク(*)を表示する。

- ①atom 項
- ②bond 項
- ③angle 項
- ④torsion 項
- ⑤improper-torsion 項
- ⑥nonbond 項

2-9. PDB ファイル出力

Sybyl mol2 入力ファイルで ttplgenL を実行した場合には、トポロジーファイルを作成するとともに、PDB ファイルも作成する。

作成される PDB ファイル名は XXX_tplL.pdb (XXX は入力ファイルの拡張子を除くファイル名)である。なお、作成される PDB ファイルでは、入力 mol2 ファイルに記載されている残基名が出力される。