

tplgeneX 詳細設計書

2018 年 2 月 5 日

Copyright (C) 2006-2018 Next Generation Natural Product Chemistry (N<sup>2</sup>PC)

---

## — 目次 —

1. tplgene について.....	1
1-1. tplgene とは.....	1
1-2. tplgeneX のシステム概要.....	1
2. tplgeneX の構成.....	3
2-1. 機能要件.....	3
3. 機能設計.....	6
3-1. 入力項目の指定.....	6
3-1-1. 引数による入力.....	6
3-1-2. 対話式による入力.....	7
3-2. ファイル読み込み.....	9
3-2-1. 座標ファイル読み込み.....	9
3-2-2. トポロジーDB ファイル読み込み.....	21
3-2-3. リガンド分子、脂質分子のトポロジーファイル読み込み.....	24
3-2-4. イオン、水のトポロジーDB ファイルの読み込み.....	24
3-3. トポロジーパラメータ設定.....	25
3-3-1. トポロジーの設定.....	25
3-3-2. 力場パラメータの設定.....	28
3-4. 座標情報の作成.....	28
3-4-1. アミノ酸/核酸残基、補因子等の欠損水素原子の補完.....	29
3-4-2. アミノ酸残基側鎖原子の欠損の補完.....	30
3-4-3. 水分子の水素原子の補完.....	30
3-5. トポロジーファイルの出力.....	31
3-6. 座標ファイルの出力.....	31
3-7. 他の機能.....	32
3-7-1. アミノ酸/核酸残基の自動認識機能.....	32
3-7-2. 同 Chain 内で残基が欠損している場合の対応.....	32
3-7-3. 自動 SS 結合作成機能.....	32
4. データ構造設計.....	33
4-1. トポロジーDB データ構造.....	33
4-2. 分子データ構造.....	37
4-3. 入出力ファイル名、オプション情報保存データのデータ構造.....	42
4-4. mmCif 入出力データのデータ構造.....	42
5. トポロジーファイルフォーマット.....	46

## 1. tplgene について

### 1-1. tplgene とは

高分子トポロジージェネレータ (tplgeneX) は、①高分子のトポロジー生成、②高分子力場パラメータ設定を行い、対応するトポロジーファイルを生成、出力するツールである。

#### ①高分子のトポロジー生成

tplgene は、与えられた原子の位置 (pdb 形式) とアミノ酸/核酸結合情報、結合角情報、二面角情報等の情報ファイル (トポロジーDB ファイル) と照合し、各アミノ酸配列・核酸配列のトポロジー情報を作成する。その際に、pdb 形式ファイルに含まれる分子には水素原子等を省略している場合がある。このように原子を省略している場合に、分子のライブラリに基づき、省略された原子を自動生成する。

また、初期内部回転角情報 (DIHED 形式) を伴うアミノ酸配列を与えられた場合にも、高分子のトポロジー情報を作成する。その際に、システイン側鎖同士が酸化して共有結合を形成し、シスチンとなった場合にも対応する。

また、tplgeneX では、従来の pdb 形式、DIHED 形式以外に、pdbx/mmCif 形式 (以下 mmCif とする) にも対応する。

#### ②高分子力場パラメータ設定

①で作成した高分子のトポロジー情報を元に分子内のポテンシャルパラメータを設定する。設定するポテンシャルパラメータを以下のものとする。

1)atom 2)charge 3)bond 4)angle 5)torsion 6)improper torsion 7)nonbond

### 1-2. tplgeneX のシステム概要

以下に、tplgeneX のシステム構成を示す。tplgeneX では、低分子トポロジージェネレータで作成されたりガンド分子のトポロジーファイルと、tplgeneX で生成するトポロジー情報を結合し、タンパク質+リガンド分子のトポロジーファイルを作成することができる。

作成されたトポロジーファイル、カーテシアン座標ファイルは、myPresto/cosgene による分子動力学シミュレーション、myPresto/sievgene によるドッキングシミュレーションなどに使用する。

従来版の tplgene では、入力ファイルは pdb, dihed ファイルの 2 種類であったが、tplgeneX では、更に mmCif 読み込みに対応する。

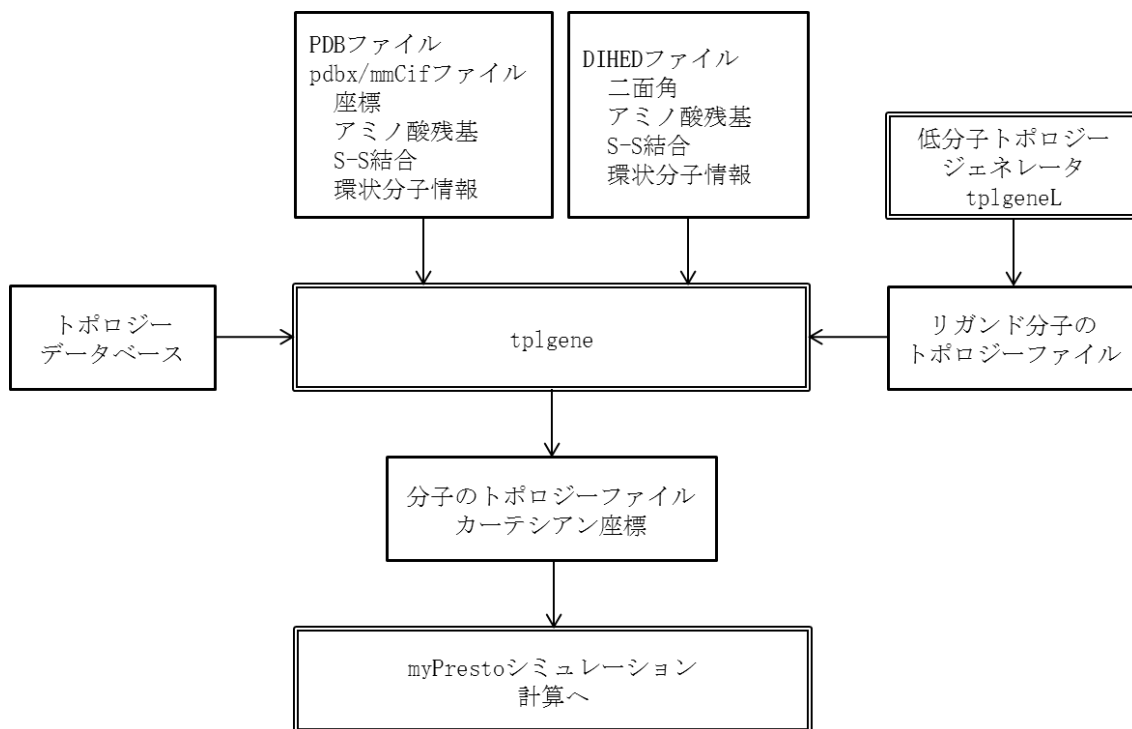


図1. tplgeneX のシステム構成

## 2. tplgeneX の構成

### 2-1. 機能要件

tplgeneX の処理(プログラム実行からトポロジーファイル出力までの各処理)における機能要件は以下の通りである。

#### ①入力項目の指定

以下の項目について、対話式、及び、引数で指定することにより読み込む機能を作成する。なお、従来版の tplgene では、アミノ酸/核酸鎖の区別を指定していたが、新版ではこの指定を行わず、入力座標ファイル中の残基名より自動認識するものとする。併せて、残基名による自動認識と関連して、旧版ではトポロジーDB 名を指定していたが、新版では、力場パラメータのバージョン等(C99、C96、charmm22 等)を指定することができるものとする。なお、ユーザが作成、修正したトポロジーDB ファイルを指定することもできる様に、従来のファイル名を指定する機能も保持するものとする。

- ・入力ファイル種別の指定(pdb、mmCif、Dihed)
- ・トポロジーDB ファイルのバージョン、又は、ファイル名の指定
- ・入力座標ファイル名の指定
- ・出力座標ファイルタイプの指定(pdb、mmCif)
- ・出力座標ファイル名の指定
- ・出力トポロジーファイル名の指定
- ・低分子トポロジーファイル名の指定(低分子リガンドを含む場合)
- ・水モデルの指定(tip3p、tip4p)

#### ②ファイル読み込み

tplgeneX では以下のファイルの読み込みを行う。

- ・座標ファイル読み込み  
pdb ファイル、mmCif ファイル、dihed 形式ファイル
- ・トポロジーDB ファイル読み込み  
AMBER parm99、AMBER parm96 トポロジーDB ファイル  
CHARMm 19 形式、CHARMm 22 トポロジーDB ファイル  
イオン、補因子等記載トポロジーDB ファイル
- ・低分子トポロジーファイル(低分子リガンドを含む場合)

#### ③トポロジーパラメータの設定

トポロジー情報の設定として以下の項目の対応を行う。

- ・ジスルフィド結合の対応
- ・環状タンパク質の対応
- ・Alternate Location Indicator の削除機能
- ・末端 CAP 残基の付与対応

また、パラメータの設定では、以下のパラメータを設定する。

- ・原子パラメータ
- ・結合パラメータ
- ・結合角パラメータ
- ・二面角パラメータ
- ・インプロパー角パラメータ
- ・FUNCTION 情報
- ・NONBOND 情報

なお、上記パラメータを設定するにあたり、欠損している水素原子、及び、欠損しているアミノ酸側鎖原子を補完した上で処理を行う。なお、アミノ酸主鎖原子が欠損している場合は、エラーとする。また、上記パラメータを設定するにあたり、ジスルフィド結合、環情報を考慮した上で行う。

また、イオン、補因子等記載トポロジーDB ファイルに記載されている補因子等についても、欠損している水素原子を補完した上で処理を行う。なお、補因子の重原子が欠損している場合は、エラーとする。

#### ④座標情報の作成

入力ファイルはタンパク質を構成するアミノ酸残基、核酸を構成する残基について、水素座標が省略されている事がある為、tplgeneX では欠損水素原子の補完を行う。また、アミノ酸の側鎖情報が欠損している場合には、側鎖原子の欠損の補完を行う。また、イオン、補因子等記載トポロジーDB ファイルに記載されている補因子等については、アミノ酸残基と同様に、欠損水素原子の補完を行う。なお、この場合、補因子の重原子情報が欠損している場合には、エラーとする。

- ・アミノ酸/核酸残基の欠損水素原子の補完
- ・アミノ酸残基側鎖原子の欠損の補完
- ・水分子の水素原子の補完
- ・登録されている補因子等の水素原子の補完

#### ⑤トポロジーファイル出力

トポロジーファイル出力時には、アミノ酸鎖、核酸鎖のトポロジー情報、パラメータ情

報の出力を行う。また、ユーザが指定した場合には、低分子リガンド、金属、水分子、補因子等のトポロジー、パラメータ情報の出力も行う。

- ・ アミノ酸、核酸鎖のトポロジー情報、パラメータ情報の出力
- ・ 低分子リガンドのトポロジー情報、パラメータ情報の出力
- ・ 金属、水分子、補因子等のトポロジー情報、パラメータ情報の出力

#### ⑥座標ファイル出力

座標ファイル出力時には、アミノ酸鎖、核酸鎖の座標情報の出力を行う。また、ユーザが指定した場合には、低分子リガンド、金属、水の座標情報の出力も行う。

- ・ アミノ酸、核酸部分の座標出力
- ・ 低分子リガンドの座標出力
- ・ 金属、水分子、補因子等の座標出力

#### ⑦他の付加機能

上記①～⑥以外の機能として、以下の機能を検討する。

- ・ 同 Chain 内で残基が欠損している場合の対応

同 Chain 内で残基が欠損している場合、鎖が途中で切れている為、異なる鎖とみなし、従来の tplgene では異なる ChainID を付与しているが、新版では同じ ChainID を付与する様にする。

- ・ 自動 SS 結合作成機能(アミノ酸鎖のみ)

ユーザが指定した場合に、2つのシステインの硫黄原子間距離を計算し、一定値以下の場合にジスルフィド結合を自動生成する機能を作成する。

- ・ 末端残基に CAP 残基を付与する機能 (アミノ酸鎖のみ)

N 末端残基に ACE(アセチル基)、C 末端残基に NME(N メチル基)を付与する機能を作成する。

### 3. 機能設計

本章では、2章で上げた機能要件についての実現方法について示す。

#### 3-1. 入力項目の指定

tplgeneX では、入力項目の指定は、2種類の入力方法(引数による入力、対話式による入力)に対応する。入力項目、入力方法を以下に示す。

##### 3-1-1. 引数による入力

tplgeneX を実行する際に、引数指定の場合の実行コマンドを示す。

実行コマンド：

```
tplgeneX -i<in_type> in_coord -o<out_type> out_coord -otpl out_tpl -db db_ver
[Options]
```

※in\_type は pdb、cif、dihed のいずれかの文字列を、out\_type は pdb、cif のいずれかの文字列を示す。また、Options は入力が任意の項目を示す。

実行例：

```
tplgeneX -ipdb input.pdb -db C99_aa.tpl -opdb output.pdb
```

以下に各オプションの意味を示す。なお、オプションは入力が必要のもの、任意のものに区別される。

No.	オプション	説明
入力座標ファイル関連(必須)		
1	-ipdb in_coord	入力 pdb ファイルの指定。in_coord は座標ファイル名。 1, 2, 3 は重複指定不可。
2	-icif in_coord	入力 mmCif ファイルの指定。
3	-idihed in_coord	入力 dihed ファイルの指定。
出力座標ファイル関連		
4	-opdb out_coord	出力 pdb ファイルの指定。out_coord は座標ファイル名。 項目 4, 5 のいずれも指定されなかった場合には、pdb 形



		式で、xxx_tpl.pdb (xxx は入力ファイル名 (拡張子除く)) が出力される。
5	-ocif out_coord	出力 mmCif ファイルの指定。 項目 4, 5 のいずれも指定されなかった場合には、pdb 形式で、xxx_tpl.pdb (xxx は入力ファイル名 (拡張子除く)) が出力される。
トポロジーDB ファイル関連		
6	-db db_ver	トポロジーDB ファイルの指定。db_ver はトポロジーDB のバージョン (C99、C96、charmm22、charmm19)、又は、DB 名を指定する。 なお、予約語 C99、C96、charmm22、charmm19 を指定した場合、以下に示すファイルを読み込む。 C99 : C99_aa_tpl、又は、C99_na_tpl (入力ファイルがアミノ酸/核酸残基を含むかで自動認識する。 C96 : C96_aa_tpl、C96_na_tpl (同上) charmm22 : charmm22_aa_all_tpl charmm19 : charmm19_aa_all_tpl その他 : 指定した名称そのもののファイルを読み込む。 本項目が指定されなかった場合には、C99 が選択される。
その他のオプション		
7	-water [tip3p tip4p]	水モデルの種類指定。tip3p、tip4p はそれぞれ TIP3P、TIP4P 水モデルを示す。指定しない場合は tip3p とみなす。
8	-ss	SS 結合の自動判定モード 指定しない場合は、入力ファイルに SS 結合情報が記載されている部分について処理を行う。
9	-term	N、C 末端の修正モード (アミノ酸のみ対応) 指定しない場合は、CAP 残基の付与を行わない。
10	-h	ヘルプの表示

## 3-1-2. 対話式による入力

対話式で処理を行う場合には、以下に示す項目の入力を行う必要がある。以下の項目の

読み込み、取得機能の作成を行う。

#### ①入力ファイル種別の指定

対象となる入力ファイルの種類を指定する。指定可能形式は、pdb、mmCif、dihed とする。

#### ②力場ファイルのファイル名の指定 (C99、C96、charmm22 等)

新版では、入力ファイルに含まれる残基がアミノ酸/核酸により、読み込む力場ファイルを自動認識させる為、ファイル名に変えてバージョンを指定するものとする。なお、従来通りのファイル名指定も許容するものとする(ユーザが作成、修正した力場ファイル等の読み込みに対応する為)。また、入力座標ファイル中にタンパク質、核酸の両方を含む場合には、指定したバージョンのアミノ酸トポロジーDB ファイル、核酸トポロジーDB ファイルの両方を読み込む。

No.	指定	トポロジーDB ファイル名	説明
1	C99	C99_aa.tpl、又は、C99_na.tpl	AMBER99 アミノ酸/核酸トポロジーDB
2	C96	C96_aa.tpl、又は、C96_na.tpl	AMBER96 アミノ酸/核酸トポロジーDB
3	charmm22	charmm22_aa_all.tpl	CHARMm22 アミノ酸トポロジーDB
4	charmm19	charmm19_aa_all.tpl	CHARMm19 アミノ酸トポロジーDB
9	実ファイル名	指定したファイル	指定したファイル名のファイルを読み込む。

#### ③入力座標ファイル名の指定

対象となる入力座標ファイルを指定する。指定可能形式は pdb(拡張子.pdb、.ent)、mmCif(拡張子.cif)、DIHED 形式(拡張子.dihed)とする。

#### ④出力座標ファイルタイプの指定 (pdb、mmCif)

出力座標ファイルタイプを指定する。指定可能形式は pdb、mmCif とする。

#### ⑤出力座標ファイル名の指定

出力座標ファイル名を指定する。

#### ⑥出力トポロジーファイル名の指定

出力トポロジーファイル名を指定する。

## ⑦低分子トポロジーファイル名の指定(低分子リガンドを含む場合)

入力ファイルにリガンド分子を含む場合に、その分子のトポロジーファイル名を指定する。

## ⑧水モデルの指定(tip3p、tip4p)

入力ファイルに水分子を含む場合、水モデルを指定する。対応モデルは tip3p、tip4p とする。

## 3-2. ファイル読み込み

tplgeneX では、座標ファイル、トポロジーDB ファイル、リガンド分子のトポロジーファイルの読み込み(リガンド分子を含む場合でのみ)を行う。

## 3-2-1. 座標ファイル読み込み

## ①pdb ファイル読み込み

tplgeneX の入力には標準的な pdb 形式ファイルに対応する。ジスルフィド結合は通常の pdb 形式(SSBOND 行の記述)に従って定義される。環状分子(N 末と C 末が結合している分子)を計算する場合には、通常の pdb 形式(LINK 行の記述)する事で処理を行う。

※従来版 tplgene では入力 pdb ファイルに CIRC キーワードを記載することにより環状分子の処理を行っていたが、本キーワードは pdb 非標準のものである為、tplgeneX では本機能は組み込まない事とする。

※ヒスチジンはイミダゾイル基の水素付加状態により、HIS( $\delta$  位に水素付加)、HISE( $\epsilon$  位に水素付加)、HIS+( $\delta$ 、 $\epsilon$  位に水素)の 3 パターンを考慮する必要がある。入力座標ファイル中で、残基名を HIS、HISE、HIS+と修正したものを使用することにより、それぞれに対応した構造として処理を行うものとする。

pdb ファイル中に複数鎖の情報が含まれている場合には、それらすべての分子について計算を行う。

```
SSBOND  1 CYS A    6    CYS A   11
LINK           N  GLU A    4                C  THR A    6    1555  1555  1.34
ATOM      20  N  GLU A    4    33.037 -5.952  10.469
```

```

ATOM    21  CA  GLU  A   4      33.629 -7.247  10.859
ATOM    22   C   GLU  A   4      32.721 -7.845  11.909
ATOM    23   O   GLU  A   4      32.470 -9.061  11.856
ATOM    24  CB  GLU  A   4      35.029 -7.100  11.439
ATOM    25  CG  GLU  A   4      36.081 -6.452  10.545
ATOM    26  CD  GLU  A   4      35.906 -5.028  10.096
ATOM    27 OE1  GLU  A   4      35.591 -4.102  10.842
ATOM    28 OE2  GLU  A   4      36.158 -4.867   8.851
TER

```

図. pdb 入力ファイル例

tplgeneX には標準的な pdb 形式ファイルを入力として使用するが、以下のキーワードをもとに計算を行う。

## a) SSBOND について

```

          1          2          3          4
1234567890123456789012345678901234567890
SSBOND   1 CYS E   48    CYS E   51
SSBOND   2 CYS E  252    CYS E  285

```

SSBOND 行の以下の情報を用いてジスルフィド結合を認識する。

- 16,30 カラム目の chain ID
- [18-21], [32-35]カラム目の残基番号

※ジスルフィド結合自動認識オプション(-ss)が指定された場合は、CYS 残基の S 原子同士の間隔を判定し、4.5 Å 以下であれば、SSBOND 情報を追加する。

また、CYS 残基の S 原子の 4.5 Å 以内に、金属原子が存在する場合は、SSBOND 情報は追加しない。

## b) ATOM について

```

          1          2          3          4          5          6          7          8
1234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890
ATOM    147  C   VAL  A   25      30.447  15.105  58.363  1.00  12.34      A1   C
ATOM    148  O   VAL  A   25      29.520  15.059  59.174  1.00  15.65      A1   O

```

```

ATOM 149 CB AVAL A 25 30.385 17.437 57.230 0.28 13.88 A1 C
ATOM 150 CB BVAL A 25 30.166 17.399 57.373 0.72 15.41 A1 C

```

ATOM 行の以下の情報を用いて計算を行う。

- [13-16]カラム目の原子名
- 17 カラム目の Alternate location indicator

※1 つの原子について複数の Alternate location indicator が検出された場合は、先に検出された原子の情報を採用し、後の情報は無視して処理を進める。

上記の場合は 149 番目の CB 情報を採用し、150 番目の CB 情報は無視する。

- [18-20]カラム目の残基名
- 22 カラム目の chainID
- [23-26]カラム目の残基番号
- [31-38], [39-46], [47-54]カラム目のカーテシアン座標

※N, C 末修飾オプションが指定された場合、N 末端に ACE, C 末端に NME 残基を付与する。

※Alternate Location Indicator が記載されている場合、最初の原子について情報を取得し、後に記載される原子は読み飛ばす。

c) HETATM について

```

          1          2          3          4          5          6          7          8
1234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890
HETATM 4165 MG    MG  1001    -1.543  46.182  -4.759  1.00 29.03          MG
HETATM 4166 MG    MG  1002    35.766  36.702  21.185  1.00 33.90          MG
HETATM 4167 0    HOH  3051    19.915  28.584   8.840  1.00 13.92          0
HETATM 4168 0    HOH  3052    18.015   8.435   1.337  1.00 15.01          0
HETATM 4169 0    HOH  3053     5.434  20.873   2.245  1.00 17.11          0

```

HETATM 行の以下の情報を用いて計算を行う。

- [13-16]カラム目の原子名
- 17 カラム目の Alternate location indicator

※1 つの原子について複数の Alternate location indicator が検出された場合は、先に検出された原子の情報を採用し、後の情報は無視して処理を進める。

- [18-20]カラム目の残基名
- [23-26]カラム目の残基番号
- [31-38], [39-46], [47-54]カラム目のカーテシアン座標

※本ツールで HETATM 行から読み込む原子、分子は以下とする。

"F", "Cl", "Br", "I", "Ca", "Cu", "Mg", "Fe", "Li", "Na", "K", "Zn", 水、\*補因子等

※補因子等の読み込みについては、イオン、補因子等記載 DB ファイル内に記載がない場合にはトポロジー生成時にエラーとなる。

d) TER について

ATOM 行の最後に記述する。1 つの pdb ファイル中に複数の分子を記述する場合には各分子の ATOM 行の最後にそれぞれ記述する。

e) LINK 行について

環状タンパク質である場合には、N 末端側の N 原子と C 末端側の C 原子の結合情報を LINK 行で指定する。LINK 行のフォーマットは以下の通りである。

	1	2	3	4	5	6	7	8
1234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890								
LINK	N	ARG	A 1		C	PHE	A 6	1555 1555 1.34

LINK 行の以下の情報を用いて計算を行う。

- [13-16]カラムの原子名 1
- [18-20]カラムの残基名 1
- [22]カラムのチェーン ID1
- [43-46]カラムの原子名 1
- [48-50]カラムの残基名 1
- [52]カラムのチェーン ID1

※LINK 行の情報が、アミノ酸以外との結合情報(アミノ酸と金属との結合等)の場合は、その情報を無視して処理を行う。

②mmCif ファイル読み込み

tplgeneX の入力では mmCif 形式ファイルに対応する。ジスルフィド結合、環状分子の情報は\_struct\_conn キーワードで定義され、原子座標の情報は\_atom\_site キーワードで定義される。本情報を読み込む事で処理を行う。なお、mmCif ファイルの読み込みは LibMyPresto

ライブラリを使用するものとする。

mmCif ファイル中に複数鎖の情報が含まれている場合には、それらすべての分子について計算を行う。

```

loop_
_struct_conn.id
_struct_conn.conn_type_id
_struct_conn.pdbx_pdb_id
_struct_conn.ptnr1_label_asym_id
_struct_conn.ptnr1_label_comp_id
_struct_conn.ptnr1_label_seq_id
_struct_conn.ptnr1_label_atom_id
_struct_conn.pdbx_ptnr1_label_alt_id
_struct_conn.pdbx_ptnr1_pdb_ins_code
_struct_conn.pdbx_ptnr1_standard_comp_id
_struct_conn.ptnr1_symmetry
_struct_conn.ptnr2_label_asym_id
_struct_conn.ptnr2_label_comp_id
_struct_conn.ptnr2_label_seq_id
_struct_conn.ptnr2_label_atom_id
_struct_conn.pdbx_ptnr2_label_alt_id
_struct_conn.pdbx_ptnr2_pdb_ins_code
_struct_conn.ptnr1_auth_asym_id
_struct_conn.ptnr1_auth_comp_id
_struct_conn.ptnr1_auth_seq_id
_struct_conn.ptnr2_auth_asym_id
_struct_conn.ptnr2_auth_comp_id
_struct_conn.ptnr2_auth_seq_id
_struct_conn.ptnr2_symmetry
disulf1  disulf ? A CYS 6  SG ? ? ? 1_555 A CYS 104 SG ? ? A CYS 6  A CYS 104 1_555
disulf2  disulf ? A CYS 8  SG ? ? ? 1_555 A CYS 35  SG ? ? A CYS 8  A CYS 35  1_555
covale1  covale ? A LYS 2  N  ? ? ? 1_555 A GLY 12  C  ? ? A LYS 2  A LYS 10  1_555
#
loop_
_atom_site.group_pdb

```

```

_atom_site.id
_atom_site.type_symbol
_atom_site.label_atom_id
_atom_site.label_alt_id
_atom_site.label_comp_id
_atom_site.label_asym_id
_atom_site.label_entity_id
_atom_site.label_seq_id
_atom_site.pdbx_pdb_ins_code
_atom_site.Cartn_x
_atom_site.Cartn_y
_atom_site.Cartn_z
_atom_site.occupancy
_atom_site.B_iso_or_equiv
_atom_site.Cartn_x_esd
_atom_site.Cartn_y_esd
_atom_site.Cartn_z_esd
_atom_site.occupancy_esd
_atom_site.B_iso_or_equiv_esd
_atom_site.pdbx_formal_charge
_atom_site.auth_seq_id
_atom_site.auth_comp_id
_atom_site.auth_asym_id
_atom_site.auth_atom_id
_atom_site.pdbx_pdb_model_num
ATOM 9 N N . LYS A 1 2 ? 28.323 42.728 83.371 1.00 28.24 ? ? ? ? ? 2 LYS A N 1
ATOM 10 C CA . LYS A 1 2 ? 29.751 42.577 83.065 1.00 26.86 ? ? ? ? ? 2 LYS A CA 1
ATOM 11 C C . LYS A 1 2 ? 30.019 42.226 81.596 1.00 26.15 ? ? ? ? ? 2 LYS A C 1
ATOM 12 O O . LYS A 1 2 ? 29.572 41.173 81.090 1.00 31.03 ? ? ? ? ? 2 LYS A O 1
ATOM 13 C CB . LYS A 1 2 ? 30.437 41.584 84.005 1.00 21.01 ? ? ? ? ? 2 LYS A CB 1
ATOM 14 C CG . LYS A 1 2 ? 31.905 41.824 84.137 1.00 21.66 ? ? ? ? ? 2 LYS A CG 1
ATOM 15 C CD . LYS A 1 2 ? 32.515 40.826 85.030 1.00 21.45 ? ? ? ? ? 2 LYS A CD 1
ATOM 16 C CE . LYS A 1 2 ? 34.011 40.943 85.090 1.00 25.64 ? ? ? ? ? 2 LYS A CE 1
ATOM 17 N NZ . LYS A 1 2 ? 34.641 39.860 85.978 1.00 33.08 ? ? ? ? ? 2 LYS A NZ 1

```

図. mmCif ファイル例



a) `_struct_conn` 情報 (pdb では SSBOND、LINK 行に相当)

mmCIF では、SSBOND、LINK 情報等の合計数が 2 個以上の場合 a-1) と、1 個の場合 a-2) では記載方式が異なる。以下、両者の記載方式について説明する。

なお、`tplgeneX` では `_struct_conn` 情報のうち、以下のキーワードの値を使用し処理を行う。

- `_struct_conn.ptnr1_label_asym_id(chainID1)`
- `_struct_conn.ptnr1_label_comp_id`(残基名 1)
- `_struct_conn.ptnr1_label_seq_id`(pdb データ中に正規に指定される鎖の ID 名 1)
- `_struct_conn.ptnr1_label_atom_id`(原子名 1)
- `_struct_conn.pdbx_ptnr1_label_alt_id`(Alternate location indicator1)
- `_struct_conn.pdbx_ptnr1_pdb_ins_code`(Insertion code1)
- `_struct_conn.ptnr2_label_asym_id(chainID2)`
- `_struct_conn.ptnr2_label_comp_id`(残基名 2)
- `_struct_conn.ptnr2_label_seq_id`(pdb データ中に正規に指定される鎖の ID 名 2)
- `_struct_conn.ptnr2_label_atom_id`(原子名 2)
- `_struct_conn.pdbx_ptnr2_label_alt_id`(Alternate location indicator2)
- `_struct_conn.pdbx_ptnr2_pdb_ins_code`(Insertion code2)
- `_struct_conn.ptnr1_auth_asym_id`(ユーザ指定 ChainID1)
- `_struct_conn.ptnr2_auth_asym_id`(ユーザ指定 ChainID2)

a-1) SSBOND、LINK 情報等の合計数が 2 個以上の場合

この場合は、`loop_` キーワードから始まり、次の `loop_` 行の前の行 (或いは先頭行が # の行) まだが、`_struct_conn` ブロックとなる。まず始めに、`_struct_conn` の各キーワードを記載し、キーワード完了後、値を横並びに記載する (以下の例では 32 個の値が記載される)。各値は、空白文字 (或いは改行) で区切られている。

```
loop_
_struct_conn.id                # キーワード 1
_struct_conn.conn_type_id     # キーワード 2
_struct_conn.pdbx_pdb_id      # キーワード 3
_struct_conn.ptnr1_label_asym_id # キーワード 4
_struct_conn.ptnr1_label_comp_id # キーワード 5
_struct_conn.ptnr1_label_seq_id # キーワード 6
_struct_conn.ptnr1_label_atom_id # キーワード 7
_struct_conn.pdbx_ptnr1_label_alt_id # キーワード 8
```

```

_struct_conn.pdbx_ptnr1_pdb_ins_code          # キーワード 9
_struct_conn.pdbx_ptnr1_standard_comp_id      # キーワード 10
_struct_conn.ptnr1_symmetry                   # キーワード 11
_struct_conn.ptnr2_label_asym_id             # キーワード 12
_struct_conn.ptnr2_label_comp_id             # キーワード 13
_struct_conn.ptnr2_label_seq_id              # キーワード 14
_struct_conn.ptnr2_label_atom_id             # キーワード 15
_struct_conn.pdbx_ptnr2_label_alt_id         # キーワード 16
_struct_conn.pdbx_ptnr2_pdb_ins_code         # キーワード 17
_struct_conn.ptnr1_auth_asym_id              # キーワード 18
_struct_conn.ptnr1_auth_comp_id              # キーワード 19
_struct_conn.ptnr1_auth_seq_id               # キーワード 20
_struct_conn.ptnr2_auth_asym_id              # キーワード 21
_struct_conn.ptnr2_auth_comp_id              # キーワード 22
_struct_conn.ptnr2_auth_seq_id               # キーワード 23
_struct_conn.ptnr2_symmetry                  # キーワード 24
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_atom_id        # キーワード 25
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_seq_id         # キーワード 26
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_comp_id        # キーワード 27
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_asym_id        # キーワード 28
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_alt_id         # キーワード 29
_struct_conn.pdbx_ptnr3_pdb_ins_code         # キーワード 30
_struct_conn.details                         # キーワード 31
_struct_conn.pdbx_dist_value                  # キーワード 32
_struct_conn.pdbx_value_order                 # キーワード 33

disulf1  disulf ? A CYS 6  SG ? ? ? 1_555 A CYS 104 SG ? ? A CYS 6  A CYS 104 1_555 ? ? ? ? ? ?
2.366 ?

disulf2  disulf ? A CYS 8  SG ? ? ? 1_555 A CYS 35  SG ? ? A CYS 8  A CYS 35  1_555 ? ? ? ? ? ?
2.028 ?

disulf3  disulf ? A CYS 19 SG ? ? ? 1_555 A CYS 34  SG ? ? A CYS 19 A CYS 34  1_555 ? ? ? ? ? ?
2.007 ?

disulf4  disulf ? A CYS 29 SG ? ? ? 1_555 A CYS 46  SG ? ? A CYS 29 A CYS 46  1_555 ? ? ? ? ? ?
2.006 ?

```

a-2) SSBOND、LINK 情報等の合計数が 1 個の場合

この場合は、キーワードと値を 1 行に記載する。キーワードと値は空白文字で区切られ

ている。

_struct_conn.id	disulf1
_struct_conn.conn_type_id	disulf
_struct_conn.pdbx_pdb_id	?
_struct_conn.ptnr1_label_asym_id	A
_struct_conn.ptnr1_label_comp_id	CYS
_struct_conn.ptnr1_label_seq_id	109
_struct_conn.ptnr1_label_atom_id	SG
_struct_conn.pdbx_ptnr1_label_alt_id	B
_struct_conn.pdbx_ptnr1_pdb_ins_code	?
_struct_conn.pdbx_ptnr1_standard_comp_id	?
_struct_conn.ptnr1_symmetry	1_555
_struct_conn.ptnr2_label_asym_id	A
_struct_conn.ptnr2_label_comp_id	CYS
_struct_conn.ptnr2_label_seq_id	112
_struct_conn.ptnr2_label_atom_id	SG
_struct_conn.pdbx_ptnr2_label_alt_id	B
_struct_conn.pdbx_ptnr2_pdb_ins_code	?
_struct_conn.ptnr1_auth_asym_id	A
_struct_conn.ptnr1_auth_comp_id	CYS
_struct_conn.ptnr1_auth_seq_id	109
_struct_conn.ptnr2_auth_asym_id	A
_struct_conn.ptnr2_auth_comp_id	CYS
_struct_conn.ptnr2_auth_seq_id	112
_struct_conn.ptnr2_symmetry	1_555
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_atom_id	?
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_seq_id	?
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_comp_id	?
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_asym_id	?
_struct_conn.pdbx_ptnr3_label_alt_id	?
_struct_conn.pdbx_ptnr3_pdb_ins_code	?
_struct_conn.details	?
_struct_conn.pdbx_dist_value	2.033
_struct_conn.pdbx_value_order	?

b) `_atom_site` 情報 (pdb では ATOM、HETATM 行に相当)

`loop_` キーワードから始まり、次の `loop_` 行の前の行 (或いは先頭行が # の行) までが、`_atom_site` ブロックとなる。本ブロックではキーワードが先に記載され、その後にキーワード数分の値が 1 行に記載される。

なお、`tplgeneX` では `_atom_site` 情報のうち、以下のキーワードの値を使用し処理を行う。

- `_atom_site.type_symbol` (元素記号)
- `_atom_site.label_atom_id` (原子名)
- `_atom_site.label_alt_id` (Alternate Location Indicator)
- `_atom_site.label_comp_id` (残基名)
- `_atom_site.label_asym_id` (ChainID)
- `_atom_site.label_seq_id` (残基番号)
- `_atom_site.label_pdb_ins_code` (Insertion code)
- `_atom_site.Cartn_x, y, z` (座標)
- `_atom_site.auth_asym_id` (ユーザ指定 ChainID)

※ `_atom_site.label_alt_id` (Alternate Location Indicator) に値を持つ場合は、先に出てきた原子の情報を採用し、後に出てきた同原子の情報は読み飛ばす。

以下 `_atom_site` 情報の記載例を示す。

```
loop_  
_atom_site.group_pdb  
_atom_site.id  
_atom_site.type_symbol  
_atom_site.label_atom_id  
_atom_site.label_alt_id  
_atom_site.label_comp_id  
_atom_site.label_asym_id  
_atom_site.label_entity_id  
_atom_site.label_seq_id  
_atom_site.pdbx_pdb_ins_code  
_atom_site.Cartn_x  
_atom_site.Cartn_y  
_atom_site.Cartn_z  
_atom_site.occupancy
```

```

_atom_site.B_iso_or_equiv
_atom_site.Cartn_x_esd
_atom_site.Cartn_y_esd
_atom_site.Cartn_z_esd
_atom_site.occupancy_esd
_atom_site.B_iso_or_equiv_esd
_atom_site.pdbx_formal_charge
_atom_site.auth_seq_id
_atom_site.auth_comp_id
_atom_site.auth_asym_id
_atom_site.auth_atom_id
_atom_site.pdbx_pdb_model_num
ATOM 1 N N . GLU A 1 2 ? 74.841 57.422 37.112 1.00 46.38 ? ? ? ? ? 2 GLU A N 1
ATOM 2 C CA . GLU A 1 2 ? 74.289 56.151 36.568 1.00 46.07 ? ? ? ? ? 2 GLU A CA 1
ATOM 3 C C . GLU A 1 2 ? 72.770 56.173 36.699 1.00 44.43 ? ? ? ? ? 2 GLU A C 1
ATOM 4 O O . GLU A 1 2 ? 72.138 57.226 36.627 1.00 45.25 ? ? ? ? ? 2 GLU A O 1
ATOM 5 C CB . GLU A 1 2 ? 74.894 54.962 37.340 1.00 47.64 ? ? ? ? ? 2 GLU A CB 1

```

### ③DIHED ファイル読み込み

タンパク質 1 分子のカーテシアン座標を生成したいときは、DIHED フォーマットファイルを使用する。このフォーマットではアミノ酸残基とジスルフィド結合情報、環状分子情報を記述するだけで使用できる。二面角情報を記述しない場合は、伸びた鎖構造を生成する。二面角情報を記述した場合は、それらの値に従った鎖構造を生成する。

pdb 中アミノ酸残基は以下のキーワードを入力する。環状分子を計算する場合は 1 行目に以下を記述する。

PRE>CIRCULAR

: この分子が環状分子であることを示す。

続いて、ジスルフィド結合を有する場合には、PRE>SSBOND を指定し、次の行以降に、ジスルフィド結合している残基番号の組を記述する。以下のように記述する。

PRE>SSBOND

3 9

: 1 行目、この分子が SS 結合を持つことを示す。  
: 3 番と 9 番の残基が SS 結合している。

20 51

: 20 番と 51 番の残基が SS 結合している。

次に、アミノ酸残基情報を記述する。キーワード'PRE>SEQUENCE'の次の行から N 末端側から順次、アミノ酸名を入力していく。1 行に 1 つのアミノ酸名を記述する。

PRE&gt;SEQUENCE

最後に二面角情報を記述する。PRE> DIHEDRAL-ANGLES で指定し、次の行以降に、N 末端から C 末端までの  $\phi$ 、 $\psi$ 、 $\omega$ 、 $\chi_1$ 、 $\chi_2$ 、... の順番に値を記述する。1 行ごとに 10 個以内の角度値を記述する。

PRE&gt;DIHEDRAL-ANGLES

180 180 180 0

180 180 180 0

180 180 180 0

: 以下に二面角の角度情報記述することを示す。

1~3 残基目の  $\phi$ 、 $\psi$ 、 $\omega$  をそれぞれ 180 と指定している。

例として、DODECA-PEPTIDE の DIHED ファイルは以下のように記述される。このペプチド鎖は 12 残基からなり、3、9 残基目の CYS-CYS 間でジスルフィド結合している。

PRE&gt;SSBONDS

3 9

PRE&gt;SEQUENCE

ASP	: 1
LYS	: 2
CYS	: 3 -----+
CYS	: 4
HIS	: 5
HIS	: 6 S-S BRIDGE
LEU	: 7
TRP	: 8
CYS	: 9 -----+
GLN	: 10
GLU	: 11
GLU	: 12

## 3-2-2. トポロジーDB ファイル読み込み

アミノ酸や核酸の残基毎の以下に示すトポロジー情報を読み込む。

- molecule 情報
- atom 情報
- bond 情報
- angle 情報
- torsion 情報
- improper-torsion 情報

## a) molecule 情報

PRE>MOLECULE キーワードで与えられる情報の読み込みを行う。読み込む情報、及び、記載例は以下の通りである。

- 残基名、及び、その残基の別名

PRE>MOLECULES

ALA	ala	1
ABA	aba	1
ADA+		1
ARG+	arg+	1
ARN		1
ASH		1

## b) atom 情報

PRE>ATOMS キーワードで与えられる情報の読み込みを行う。読み込む情報、及び、記載例は以下の通りである。

- 原子名
- 原子タイプ
- 原子タイプ番号
- 残基名
- のりしろ部か否かを示すフラグ(0 : PRE 残基部、1 : 残基、2 : POST 残基部)
- 原子質量
- van der Waals 半径
- 原子電荷
- 1-2 結合数
- 1-3 結合数

- 1-4 結合数
- 1-2 結合している原子の相対番号
- 1-3 結合している原子の相対番号
- 1-4 結合している原子の相対番号
- z-matrix を構成する結合原子、結合角原子、二面角原子、二面角基準原子の相対番号
- z-matrix を構成する原子との結合長、結合角、二面角値

```
PRE>ATOMS
```

```
ALA
```

```
;NUMBER OF ATOMS = 14
```

```
CA CT 2 PRE 0 12.010 1.9080 0.0337 1 2 2; 1
```

```
< 1 2 3 4 5
```

```
< 0 0 0 0 0.000 0.000 0.000
```

```
C C 1 PRE 0 12.010 1.9080 0.5973 2 2 3; 2
```

```
< 1 2 3 4 5 6 10
```

```
< 0 0 0 0 0.000 0.000 0.000
```

```
O O 16 PRE 0 16.000 1.6612 -0.5679 0 1 2; 3
```

```
< 1 2 3
```

```
< 0 0 0 0 0.000 0.000 0.000
```

```
N N 15 ALA 1 14.010 1.8240 -0.4157 2 3 5; 4
```

```
< 1 2 3 4 8 5 6 7 9 10
```

```
< 0 0 0 0 0.000 0.000 0.000
```

```
H H 3 ALA 1 1.008 0.6000 0.2719 0 1 3; 5
```

```
< 1 2 3 7
```

```
< -1 -3 -4 1 1.010 119.800 0.000
```

c) bond 情報

PRE>BONDS キーワードで与えられる情報の読み込みを行う。読み込む情報、及び、記載例は以下の通りである。

- 結合を構成する原子の番号
- 力場定数
- 平衡結合長

```
PRE>BONDS
```

```
ALA
```

```
;NUMBER OF BONDS = 12
```



1	2	317.00	1.5220;	1
2	3	570.00	1.2290;	2
2	4	490.00	1.3350;	3

## d) angle 情報

PRE>ANGLES キーワードで与えられる情報の読み込みを行う。読み込む情報、及び、記載例は以下の通りである。

- ・結合角を構成する原子の番号
- ・力場定数
- ・平衡結合角

```
PRE>ANGLES
```

```
ALA
```

```
;NUMBER OF ANGLES = 19
```

1	2	3	80.00	120.4000;	1
1	2	4	70.00	116.6000;	2
3	2	4	80.00	122.9000;	3

## e) torsion 情報

PRE>TORSIONS キーワードで与えられる情報の読み込みを行う。読み込んだ情報、及び、記載例は以下の通りである。

- ・二面角を構成する原子の番号
- ・力場定数
- ・同一の共有結合の回りにある内部回転角の総数
- ・ $2\pi$ を単位とした回転対称の数
- ・位相
- ・1-4 相互作用における非共有結合のカウントのためのフラグ

1の時には、1-4 非共有結合エネルギーを計算する。

```
PRE>TORSIONS
```

```
ALA
```

```
;NUMBER OF TORSIONS = 32
```

1	2	4	5	10.0000	4	2	180.000	1;	1
1	2	4	6	10.0000	4	2	180.000	1;	2
3	2	4	5	2.5000	1	2	180.000	1;	3

## f) improper-torsion 情報

PRE>IMPROPER-TORSIONS キーワードで与えられる情報の読み込みを行う。読み込んだ情報、及び、記載例は以下の通りである。

- ・ 二面角を構成する原子の番号
- ・ 力場定数
- ・ 同一の共有結合の回りにある内部回転角の総数
- ・  $2\pi$  を単位とした回転対称の数
- ・ 位相
- ・ 1-4 相互作用における非共有結合のカウントのためのフラグ

1 の時には、1-4 非共有結合エネルギーを計算する。

```
PRE>IMPROPER-TORSIONS
```

```
ALA
```

```
;NUMBER OF IMPROPER-TORSIONS =      2
      1      4      2      3      10.5000      1      2      180.000      0;  1
;  CT      N      C      0
      2      6      4      5      1.1000      1      2      180.000      0;  2
;  C      CT      N      H
```

## 3-2-3. リガンド分子、脂質分子のトポロジーファイル読み込み

ATOM 行、HETATM 行にリガンド分子の情報が記載されている場合、対応するリガンドトポロジーファイルを読み込む。

リガンド分子、脂質分子は、残基名の先頭の 2 文字で、以下のように判別する。

残基名の先頭 2 文字	判別
LG	リガンド分子
LP	脂質分子

入力 pdb ファイルに “REMARK ORGTPL= “行が存在する際に、記載のリガンド分子、脂質分子のトポロジーファイル名を取得する。記載がない場合は、対話式に入力する。

指定したトポロジーファイルは、DB ファイルが配置されたディレクトリ、カレントディレクトリの順番で探索し、先に見つかった方のトポロジーファイルを使用する。

## 3-2-4. イオン、水のトポロジーDB ファイルの読み込み

ATOM 行、HETATM 行にイオン・水分子の情報が記載されている場合、以下に示すイオン・

水分子のトポロジー情報を読み込む。

- atom 情報
  - bond 情報(水分子のみ)
  - angle 情報(水分子のみ)
- ※bond、angle の情報は、水分子のみ。

### 3-3. トポロジーパラメータ設定

#### 3-3-1. トポロジーの設定

##### 3-3-1-1. トポロジーの設定

以下の流れに従い、トポロジー(原子間のつながり情報)を設定する。

##### ①入力座標ファイルとトポロジーDB ファイル内での残基名のチェック

まず、入力座標ファイル中の各残基名と、トポロジーDB ファイル中の残基名のチェックを行う。

一致した場合、トポロジーDB 中の一致した残基の情報(その残基の原子数、1-2、1-3、1-4 相互作用原子の相対番号情報)を構造体変数に保存する。

②着目している残基の原子に番号を割り当てるとともに、原子の開始番号、終了番号を計算する。

原子の開始番号 = 前残基の終了番号 + 1

原子の終了番号 = 開始番号 + その残基の原子数 - 1

着目している残基中の原子の番号は(原子の開始番号)～(原子の終了番号)の範囲で通し番号で設定される。

③トポロジー情報を生成する。

①の処理で 1-2、1-3、1-4 相互作用原子の相対番号を取得し、②の処理で全ての残基の全ての原子の番号が設定されたため、全原子のトポロジー情報を作成することができる。

例えば、ALA 残基の CB 原子の番号が 20 であった場合、以下に示す DB データであった場合、この原子とのトポロジー情報は、

結合している原子の原子番号 : 21 (=20+1)、22 (=20+2)、23 (=20+3)

結合角原子の原子番号 : 24 (=20+4)

二面角原子の原子番号 : 25 (=20+5)、26 (=20+6)

DB データ例 :

```
CB      CT      2 ALA      1  12.010    1.9080  -0.1825  3 1 2; 8
                                           ; 1-2、1-3、1-4 相互作用原子数
```

```
< 1 2 3 4 5 6
   ; 1-2 原子、1-3 原子、1-4 原子の相対番号
```

```
< -2 -4 -6  4      1.526    109.700    60.000
```

### 3-3-1-2. ジスルフィド結合の対応

ジスルフィド結合している場合、ジスルフィド結合先の原子の番号は、3-3-1-1②で設定した対応残基(CYS)の対応する原子の番号を設定する。

DB 記載例 :

```
SG      S      22 CYSS      1  32.060    2.0000  -0.1081  1 1 4; 11
```

```
< 4 5 1 6 7 8
   ; 15(=11+4)、16(=11+5)、17(11+6)、18(11+7)、19(11+8)はジスルフィド結合先の原子で
   ; あるため、DB 中の番号ではなく、結合先の原子の原子番号を割り当てることとなる。
```

```
< -3 -5 -7  0      1.810    114.700    180.000
```

```
C      C      1 CYSS      1  12.010    1.9080    0.5973  2  0  0; 12
```

```
< 1  2
```

```
< -6 -8 -10  0      1.522    110.100    180.000
```

```
O      O      16 CYSS      1  16.000    1.6612  -0.5679  0  1  0; 13
```

```
< 1
```

```
< -1 -7 -9  1      1.229    120.400    0.000
```

```
N      N      15 POST      2  14.010    1.8240  -0.4157  0  0  0; 14
```

```
< -2 -8 -10  0      1.335    116.600    180.000
```

; 以下の原子はジスルフィド結合している先の CYS 残基の原子情報を示す。

```
SG      S      22 CYSS      3  32.060    2.0000  -0.1081  1  3  0; 15
```

```
< 1  2  3  4
```

```
< 0  0  0  0      0.000    0.000    0.000
```

```
CB      CT      2 CYSS      3  12.010    1.9080  -0.0790  3  0  0; 16
```

```
< 1  2  3
```

```
< 0  0  0  0      0.000    0.000    0.000
```

```
HB2     H1      7 CYSS      3  1.008    1.3870  0.0910  0  2  0; 17
```

```
< 1  2
```

```
< 0  0  0  0      0.000    0.000    0.000
```

```
HB3     H1      7 CYSS      3  1.008    1.3870  0.0910  0  1  0; 18
```

```

< 1
< 0 0 0 0      0.000      0.000      0.000
CA      CT      2 CYSS      3  12.010      1.9080      0.0429      0 0 0; 19
< 0 0 0 0      0.000      0.000      0.000

```

### 3-3-1-3. 環状タンパク質の対応

環状タンパク質の場合、C 末端の 1-2、1-3、1-4 相互作用原子に関する番号について、N 末端側の残基と相互作用している部分については、N 末端の対象原子の番号を割り当てる。

例えば pdb ファイルの場合、入力分子内に環状分子を含む場合には、LINK 行を指定する事により、指定した原子間が結合されているものとして、トポロジーを生成する。以下の例の場合には、チェーン ID A の残基番号 1、ARG の N 原子と、残基番号 6 の ARG の C 原子が結合しているものとして処理を行う。

pdb、LINK 行指定による、環状分子の設定

LINK	N	ARG A	1	C	ARG A	6	1555	1555	1.34	
ATOM	1	N	ARG A	1	0.500	1.464	2.077	1.00	0.00	N
ATOM	2	CA	ARG A	1	-0.735	0.690	2.233	1.00	0.00	C
ATOM	3	C	ARG A	1	-0.487	-0.705	2.838	1.00	0.00	C
...										
ATOM	117	N	ARG A	6	2.805	2.776	1.051	1.00	0.00	N
ATOM	118	CA	ARG A	6	1.826	3.549	1.829	1.00	0.00	C
ATOM	119	C	ARG A	6	0.598	2.773	2.349	1.00	0.00	C
ATOM	120	O	ARG A	6	-0.262	3.375	2.994	1.00	0.00	O
ATOM	121	CB	ARG A	6	1.368	4.781	1.022	1.00	0.00	C
ATOM	122	CG	ARG A	6	2.453	5.856	0.896	1.00	0.00	C
ATOM	123	CD	ARG A	6	1.878	7.060	0.140	1.00	0.00	C
ATOM	124	NE	ARG A	6	2.916	8.035	-0.221	1.00	0.00	N
ATOM	125	CZ	ARG A	6	2.730	9.085	-1.039	1.00	0.00	C
ATOM	126	NH1	ARG A	6	1.535	9.348	-1.584	1.00	0.00	N
ATOM	127	NH2	ARG A	6	3.761	9.891	-1.318	1.00	0.00	N
TER										

### 3-3-1-4. 末端の CAP 残基の付与対応

プログラム実行時に CAP 残基付与オプションを指定した場合、タンパク質の N 末端をアセチル基(ACE)で、C 末端を N メチル基(NME)で修飾する。但し、既にアミノ酸残基以外の残基でキャップされている場合には、修飾は行わない。本機能は、アミノ酸分子のみ対応し、核酸分子では処理を行わない。

CAP 残基を付与する場合には、CAP 残基の原子数を考慮した上で原子の番号の設定、トポロジーの設定を行う。(例えば、N 末端にアセチル基(ACE, CH3CO)を付与する場合、3-3-1-1での原子の番号とアセチル基の原子数(6 原子)分ずれることとなる。)

### 3-3-2. 力場パラメータの設定

#### 3-3-2-1. 原子パラメータの設定

入力座標ファイル中の各残基名と、トポロジーDB ファイル中の残基名のチェックを行う。一致した場合、トポロジーDB 中の一致した残基中の各原子の原子情報(原子タイプ、原子タイプ番号、原子質量、van der Waals 半径、原子電荷、1-2, 1-3, 1-4 相互作用原子数、1-2, 1-3, 1-4 相互作用原子の相対番号、z-matrix 情報)を構造体変数に保存する。

#### 3-3-2-2. 結合パラメータの設定

入力座標ファイル中の各残基名と、トポロジーDB ファイル名の残基名のチェックを行い、一致した場合、トポロジーDB 中の一致した残基の結合情報(力場定数、平衡結合長)を構造体変数に保存する。結合している原子の番号については、DB 中に記載の番号ではなく、3-3-1-1②で設定した原子の番号を保存する。

#### 3-3-2-3. 結合角パラメータの設定

結合パラメータの設定と同様の手法で結合角情報(力場定数、平衡結合角)を構造体変数に保存する。結合している原子の番号についても、3-3-1-1②で設定した原子の番号を保存する。

#### 3-3-2-4. 二面角パラメータの設定

結合パラメータの設定と同様の手法で結合角情報(力場定数、内部回転角の総数、回転対称数、位相、フラグ)を構造体変数に保存する。結合している原子の番号についても、3-3-1-1②で設定した原子の番号を保存する。

#### 3-3-2-5. インプロパー二面角パラメータの設定

結合パラメータの設定と同様の手法で結合角情報(力場定数、内部回転角の総数、回転対称数、位相、フラグ)を構造体変数に保存する。結合している原子の番号についても、3-3-1-1②で設定した原子の番号を保存する。

### 3-4. 座標情報の作成

入力座標ファイルは、水素座標が欠損している場合や、側鎖の原子座標が欠損している場合があるが、tplgeneX ではこれらの欠損を補完した上で座標ファイルを出力する。以下、原子欠損の場合の座標の補完について示す。

## 3-4-1. アミノ酸/核酸残基、補因子等の欠損水素原子の補完

トポロジーDB ファイルに記載されている z-matrix 情報を使用して、欠損水素原子の補完を行う。例えば、ALA の CB 原子と結合している水素原子の座標を計算する場合、以下の除法を用いてカーテシアン座標を計算する。

HB1 原子 : HB1 - CB(8) の結合長 1.090 Å、

HB1 - CB(8) - CA(6) の結合角 109.5 度、

HB1 - CB(b) - CA(6) - N(4) の二面角 60.0 度

HB2 原子 : HB2 - CB(8) の結合長 1.090 Å、

HB2 - CB(8) - CA(6) の結合角 109.5 度、

HB2 - CB(b) - CA(6) - N(4) の二面角 180.0 度

HB3 原子 : HB3 - CB(8) の結合長 1.090 Å、

HB3 - CB(8) - CA(6) の結合角 109.5 度、

HB3 - CB(b) - CA(6) - N(4) の二面角 -60.0 度

DB 記載例 : (一部抜粋)

N	N	15	ALA	1	14.010	1.8240	-0.4157	2	3	5; 4
H	H	3	ALA	1	1.008	0.6000	0.2719	0	1	3; 5
CA	CT	2	ALA	1	12.010	1.9080	0.0337	3	5	0; 6
HA	H1	7	ALA	1	1.008	1.3870	0.0823	0	2	5; 7
CB	CT	2	ALA	1	12.010	1.9080	-0.1825	3	1	2; 8
<b>HB1</b>	HC	6	ALA	1	1.008	1.4870	0.0603	0	2	1; 9
<	1	2	3							
<	<b>-1</b>	<b>-3</b>	<b>-5</b>	<b>0</b>	<b>1.090</b>	<b>109.500</b>	<b>60.000</b>			
<b>HB2</b>	HC	6	ALA	1	1.008	1.4870	0.0603	0	1	1; 10
<	1	2								
<	<b>-2</b>	<b>-4</b>	<b>-6</b>	<b>-1</b>	<b>1.090</b>	<b>109.500</b>	<b>180.000</b>			
<b>HB3</b>	HC	6	ALA	1	1.008	1.4870	0.0603	0	0	1; 11
<	1									
<	<b>-3</b>	<b>-5</b>	<b>-7</b>	<b>-2</b>	<b>1.090</b>	<b>109.500</b>	<b>-60.000</b>			
C	C	1	ALA	1	12.010	1.9080	0.5973	2	0	0; 12
O	O	16	ALA	1	16.000	1.6612	-0.5679	0	1	0; 13

## 3-4-2. アミノ酸残基側鎖原子の欠損の補完

3-4-1. アミノ酸/核酸残基の欠損水素原子の補完で示した方法と同様の方法で、側鎖原子の座標の計算を行う。

なお、トポロジーDB ファイルでは、z-matrix 情報は、主鎖原子を基準原子として設定されているため、主鎖原子が欠損していた場合、座標の計算を行うことができないため、エラーとして処理を終了する。

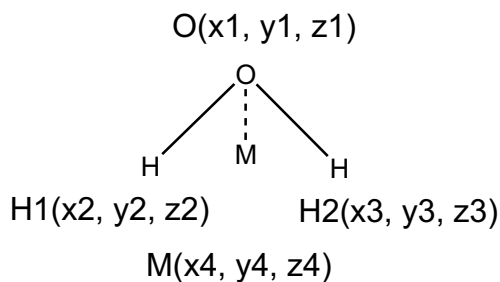
## 3-4-3. 水分子の水素原子の補完

水分子の情報を読み込んだ場合、O 原子の座標を基点に H 原子の座標を計算する。また、tip4p 水モデルを指定している場合、電荷点 M の座標を計算する(質点 M の座標は H-O-H の二等分線上に位置する)。

水素原子の座標計算について (tip3p、tip4p 水共通)

以下の式に従って、水素原子 (H1、H2)、及び、電荷点 M の座標を計算する。

## 【水分子モデル】



OH 結合長 (bond) : 0.9572 Å  
 OM 長 (bond\_m) : 0.1500 Å  
 H1-O-H2 結合角 (angle) : 104.52 度

H1 座標 (tip3p、tip4p 共通)

$$\begin{aligned}x2 &= \cos(\text{angle} * 0.5) * \text{bond} + x1 \\y2 &= \sin(\text{angle} * 0.5) * \text{bond} + y1 \\z2 &= z1\end{aligned}$$

H2 座標 (tip3p、tip4p 共通)

$$\begin{aligned}x3 &= \cos(\text{angle} * 0.5) * \text{bond} + x1 \\y3 &= -\sin(\text{angle} * 0.5) * \text{bond} + y1 \\z3 &= z1\end{aligned}$$



M 座標 (tip4p のみ)

$$x4 = x1 + \text{bond\_m}$$

$$y4 = y1$$

$$z4 = z1$$

### 3-5. トポロジーファイルの出力

作成したトポロジー、パラメータ情報を出力する。tplgene では、以下のパターンのトポロジーファイルを出力することができる。

- ・タンパク質のトポロジーファイル
- ・核酸のトポロジーファイル
- ・タンパク質+低分子+水+イオン+補因子等のトポロジーファイル
- ・核酸+低分子+水+イオン+補因子等のトポロジーファイル
- ・タンパク質+核酸+低分子+水+イオン+補因子等のトポロジーファイル
- ・低分子+水+イオン+補因子等のトポロジーファイル

また、複合体のトポロジー出力時に、複数種類の水、イオン等が存在する場合(例えば、入力ファイル中に水、イオンがある状態で、CAP 水や生理食塩水濃度の Na、Cl を付与する場合等)には、これらのトポロジー情報は複数回記載されることとなる。その場合、同じ分子名称を使用した場合には、cosgene 処理でエラーとなる為、区別する為に、分子名の後ろに数字を付与して出力する(Na1、Na2、Cl5、、等)。

### 3-6. 座標ファイルの出力

座標ファイルは、ユーザの指定により、pdb 形式、mmCif 形式を選択して出力する。

生成した座標ファイルを pdb ファイルフォーマットで出力する。pdb 出力の際にタンパク質、リガンド、核酸、鉄、亜鉛、マグネシウムなどについては、チェーンの終わりに TER 行を出力して、分子を区切るものとする。また、水、Na イオン、Cl イオンについては、個々の分子には TER を出力せず、水のグループ、Na イオンのグループ、Cl イオンのグループの末尾に TER 行を出力する。また、タンパク質、核酸以外の分子については、HETATM 行で座標情報を出力する。

### 3-7. 他の機能

#### 3-7-1. アミノ酸/核酸残基の自動認識機能

従来の tplgene では、アミノ酸/核酸のトポロジーDB ファイルをユーザが指定して処理を行っていたが、tplgeneX ではトポロジーDB ファイルのバージョン(C99、C96、charmm21 等)を指定するものとする。

入力座標ファイルの残基名と指定したバージョンのアミノ酸 DB ファイル、核酸 DB ファイル中の残基名を比較し、一致した DB ファイルの情報を用いてトポロジー、パラメータを割り当てるものとする。

#### 3-7-2. 同 Chain 内で残基が欠損している場合の対応

従来の tplgene では、入力座標ファイルにおいて同じ ChainID にもかかわらず、実験的に座標が確定できないなど、主鎖原子の座標が存在しない場合には、その鎖は切れているものとして、異なる ChainID を付与していた。新版では、入力ファイルと同じ ChainID を付与する様にする。なお、入力座標ファイルが mmCif 形式ファイルの場合、内部処理で一時的に異なる ChainID を使用する必要がある場合、\_atom\_site.auth\_asym\_id(author が指定する ChainID)を使用するなど、混乱が生じない様な作りとする。

#### 3-7-3. 自動 SS 結合作成機能

プログラム実行時に ss オプションを指定した場合、入力タンパク質内のシステイン(CYS)の硫黄原子間距離を計算し、2.5 Å以下であれば、出力ファイルにSSBOND 情報を追加する。

但し、CYS 残基の S 原子の 2.5 Å以内に、金属原子が存在する場合は、SSBOND 情報は追加しない。

## 4. データ構造設計

4章では、tplgeneXにおけるデータ構造を示す。ここでは、トポロジーDB データ構造、及び、分子データ構造について示す。トポロジーDB データ構造は、トポロジーDB ファイルから読み込んだ情報を保存する為に定義されるものであり、分子データ構造は、入力座標ファイルから読み込んだ情報や、内部処理による作成した各種の値を保存し、ファイル出力の際に各変数が参照されるものである。

### 4-1. トポロジーDB データ構造

ここでは、tplgene DB ファイルを読み込んだ際の各情報を保存する構造体を定義する。

#### ①原子情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	原子名	char []	12	1-2 相互作用原子番号	int ポインタ
2	原子タイプ	char []	13	1-3 相互作用原子番号	int ポインタ
3	原子タイプ番号	int	14	1-4 相互作用原子番号	int ポインタ
4	残基名	char []	15	結合原子相対番号	int
5	残基番号	int	16	結合角原子相対番号	int
6	原子質量	double	17	二面角原子相対番号	int
7	原子半径	double	18	二面角基準原子相対番号	int
8	原子電荷	double	19	結合長	double
9	1-2 相互作用原子数	int	20	結合角	double
10	1-3 相互作用原子数	int	21	二面角	double
11	1-4 相互作用原子数	int	22	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## ②結合情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	結合を構成する原子の番号の組	int[]	5	力場定数	double
2	結合を構成する原子の原子タイプの組	char [][]	6	平衡結合長	double
3	結合を構成する原子の原子名	char[][]	7	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ
4	結合を構成する原子が属する残基の情報を保持する変数	short[]			

## ③結合角情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	結合角を構成する原子の番号の組	int[]	6	平衡結合角	double
2	結合角を構成する原子の原子タイプの組	char [][]	7	Urey-Bradley の力場定数	double
3	力場定数	double	8	Urey-Bradley の 1-3 相互作用の平衡結合長	double
4	結合角を構成する原子の原子名	char[][]	9	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ
5	結合角を構成する原子が属する残基の情報を保持する変数	short[]			

## ④二面角情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	二面角を構成する 原子の番号の組	int[]	6	内部回転角の総数	int
2	二面角を構成する 原子の原子タイプ の組	char [][]	7	$2\pi$ を単位とした 回転対称の数	double
3	二面角を構成する 原子の原子名	char[][]	8	位相	double
4	二面角を構成する 原子が属する残基 の情報を保持する 変数	short[]	9	1-4 相互作用計算 フラグ	int
5	力場定数	double	10	自己参照構造体ポ インタ	構造体ポインタ

## ⑤前後残基との結合情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	z-matrixを構成す る原子の原子名	char[][]	3	z-matrix 結合角	double
2	着目している原子 群が属する残基の 情報を保持する変 数	short[]	4	z-matrix 二面角	double
3	着目している原子 の番号 (i, j, k, l)	各変数ともに int	5	自己参照構造体ポ インタ	構造体ポインタ
4	z-matrix 結合長	char [][]			

## ⑥残基情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	残基名、及び、残 基名の別名(併せ て残基名称と呼	char[][]	6	二面角の数	int

	ぶ)				
2	残基名称の数	int	7	インプロパー二面角の数	int
3	原子の数	int	8	前後残基との結合情報保存構造体変数の数	int
4	結合の数	int	9	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ
5	結合角の数	int			

## ⑦Function 情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	関数番号	int	3	コメント	char[]
2	この関数で使用するパラメータ総数	int			

## ⑧Nonbond 情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	原子タイプ番号 i (AMBER 力場用)	int	6	1-4vdW エネルギーの定数	double
2	原子タイプ番号 j (AMBER 力場用)	int	7	1-4 相互作用エネルギーの定数	double
3	原子タイプ番号 (Charmm 力場用)	int	8	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ
4	関数タイプ番号	int			
5	vdW 半径	double			

## ⑨DB 情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	残基数	int	3	nonbond の数	int
2	Function の数	int	4	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## 4-2. 分子データ構造

ここでは、入力座標ファイルの情報や、内部処理で設定した各種値を保存する構造体を定義する。

## ①原子情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	原子名	char[]	17	1-2 相互作用原子番号	int []
2	alternate location indicator	char	18	1-3 相互作用原子番号	int []
3	残基名	char[]	19	1-4 相互作用原子番号	int []
4	chainID	char	20	結合原子相対番号	int
5	残基番号	int	21	結合角原子相対番号	int
6	insersion code	char	22	二面角原子相対番号	int
7	座標	double[]	23	二面角基準原子相対番号	int
8	原子タイプ	char[]	24	結合原子の原子名	char[]
9	原子タイプ番号	int	25	結合原子の原子名	char[]
10	残基番号	double	26	結合原子の原子名	char[]
11	原子質量	double	27	二面角基準原子の原子名	char[]
12	原子半径	double	28	結合長	double
13	原子電荷	double	29	結合角	double
14	1-2 相互作用原子数	int	30	二面角	double
15	1-3 相互作用原子数	int	31	原子の通し番号	int
16	1-4 相互作用原子数	int	32	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## ②結合情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	結合を構成する原子の番号の組	int[]	4	力場定数	double
2	結合を構成する原子の原子タイプの組	char [][]	5	平衡結合長	double
3	結合を構成する原子が属する残基の情報を保持する変数	short[]	6	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## ③結合角情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	結合角を構成する原子の番号の組	int[]	5	Urey-Bradley の力場定数	double
2	結合角を構成する原子の原子タイプの組	char [][]	6	Urey-Bradley の 1-3 相互作用の平衡結合長	double
3	力場定数	double	7	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ
4	平衡結合角	double			

## ④二面角情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	二面角を構成する原子の番号の組	int[]	5	$2\pi$ を単位とした回転対称の数	double
2	二面角を構成する原子の原子タイプの組	char [][]	6	位相	double
3	力場定数	double	7	1-4 相互作用計算フラグ	int
4	内部回転角の総数	int	8	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ



				インタ	
--	--	--	--	-----	--

## ⑤残基情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	原子数	int	18	SS 結合している先の残基の残基名	char[]
2	結合の数	int	19	SS 結合している先の残基の ChainID	char
3	結合角の数	int	20	SS 結合している先の残基の残基番号	int
4	二面角の数	int	21	SS 結合している先の残基の insersion code	char
5	インプロパー角の数	int	22	環状アミノ酸の結合先の残基名	char[]
6	残基名	char[]	23	環状アミノ酸の結合先の chainID	char
7	presto形式の残基名	char[]	24	環状アミノ酸の結合先の残基番号	int
8	入力ファイルでの chainID	char[]	25	環状アミノ酸の結合先の insersion code	char
9	本プログラム内の chainID	char	26	環状アミノ酸の結合先の原子名	char[]
10	残基番号	int	27	alternate location indicator	char
11	insersion code	char	22	環状アミノ酸の結合先の原子の alternate location indicator	char
12	N 末端か否かを示すフラグ	short	23	dihed ファイル読み込み時の	double []

				dihedral 情報	
13	C 末端か否かを示すフラグ	short	24	原子情報保存構造体へのポインタ	構造体ポインタ
14	環状アミノ酸フラグ(N 末端側)	short	25	結合情報保存構造体へのポインタ	構造体ポインタ
15	環状アミノ酸フラグ(C 末端側)	short	26	結合角情報保存構造体へのポインタ	構造体ポインタ
16	SS 結合フラグ(前側の残基)	short	27	二面角情報保存構造体へのポインタ	構造体ポインタ
17	SS 結合フラグ(後側の残基)	short			

## ⑥分子情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	原子数	int	5	インプロパー角数	int
2	結合数	int	6	分子名称	char[]
3	結合角数	int	7	鎖 ID	char
4	二面角数	int	8	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## ⑦ジスルフィド結合情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	通し番号	int	6	SS 結合している残基 2 の残基名	char[]
2	SS 結合している残基 1 の残基名	char[]	7	SS 結合している残基 1 の ChainID	char
3	SS 結合している残基 1 の ChainID	char	8	SS 結合している残基 1 の残基番号	int
4	SS 結合している残基 1 の残基番号	int	9	SS 結合している残基 1 の insertion code	char
5	SS 結合している残基 1 の insertion code	char	10	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## ⑧環情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	環状アミノ酸の結合部位の原子名(N末端側)	char[]	7	環状アミノ酸の結合部位の原子名(C末端側)	char[]
2	環状アミノ酸の結合部位のalternate location indicator(N末端側)	char	8	環状アミノ酸の結合部位のalternate location indicator(C末端側)	char
3	環状アミノ酸の結合部位の残基名(N末端側)	char[]	9	環状アミノ酸の結合部位の残基名(C末端側)	char[]
4	環状アミノ酸の結合部位のChainID(N末端側)	char	10	環状アミノ酸の結合部位のChainID(C末端側)	char
5	環状アミノ酸の結合部位の残基番号(N末端側)	int	11	環状アミノ酸の結合部位の残基番号(C末端側)	int
6	環状アミノ酸の結合部位の残基のinsertion code(N末端側)	char	12	環状アミノ酸の結合部位の残基のinsertion code(C末端側)	char
			13	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## ⑨分子系情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	分子の数	int	5	chainIDの数	int
2	SS結合の数	int	6	SS結合情報保存構造体ポインタ	構造体ポインタ

3	LINK 情報の数	int	7	環情報構造体ポインタ	構造体ポインタ
4	系内の chainID 一覧	char[]	8	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## 4-3. 入出力ファイル名、オプション情報保存データのデータ構造

入出力ファイル名や各種オプション情報を保存するデータのデータ構造について示す。

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	入力座標ファイル名	char[]	8	水モデル種別	short
2	トポロジーDBファイル名	char[]	9	自動 SS 結合設定フラグ	short
3	金属、水の DB ファイル名	char[]	10	CAP 残基の付与フラグ	short
4	出力座標ファイル名	char[]	11	入力ファイルタイプ	short
5	出力トポロジーファイル名	char[]	12	出力ファイルタイプ	short
6	入力データ種別 (タンパク質/核酸)	short	13	トポロジーファイルのタイプ	short
7	力場ファイル種別	short			

## 4-4. mmCif 入出力データのデータ構造

tplgeneX では、入力座標ファイルは pdb、mmCif、dihed の 3 種類に対応する。そのうち、mmCif 形式の入出力は LibMyPresto ライブラリを使用するものとする。以下に LibMyPresto ライブラリのデータ構造を示す。

## ①原子情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
-----	----	-----	-----	----	-----

1	通し番号	int	17	原子電荷(cif)	char[]
2	pdbの原子番号	int	18	モデル番号	int
3	原子名	char[]	19	atom_site.id	int
4	alternate location indicator	char[]	20	label_atom_id	char[]
5	残基名	char[]	21	label_alt_id	char[]
6	chainID	char[]	22	label_comp_id	char[]
7	残基番号	int	23	label_asym_id	char[]
8	残基番号(通し番 号)	int	24	label_entity_id	char[]
9	insersion code	char[]	25	label_seq_id	char[]
10	x座標	float	26	pdpx_pdb_ins_code	char[]
11	y座標	float	27	cartn_x_esd	char[]
12	z座標	float	28	cartn_y_esd	char[]
13	occupancy	float	29	cartn_z_esd	char[]
14	tempFactor	float	30	occupancy_esd	char[]
15	元素記号	char[]	31	b_iso_or_equiv_esd	char[]
16	原子電荷(pdb)	char[]			

## ②ジスルフィド結合、環状分子情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	通し番号	int	21	ptnr1_label_asym_id	char[]
2	結合の番号	int	22	ptnr1_label_comp_id	char[]
3	原子名1	char[]	23	ptnr1_label_seq_id	char[]
4	残基名1	char[]	24	pdpx_ptnr1_label_alt_id	char[]
5	chainID1	char[]	25	pdpx_ptnr1_pdb_ins_code	char[]
6	残基番号1	int	26	pdpx_ptnr1_standard_comp_id	char[]
7	insersion code1	char[]	27	ptnr2_label_asym_id	char[]
8	原子名2	char[]	28	ptnr2_label_comp_id	char[]
9	残基名2	char[]	29	ptnr2_label_seq_id	char[]
10	chainID2	char[]	30	pdpx_ptnr2_label_alt_id	char[]
11	残基番号2	int	31	pdpx_ptnr2_pdb_ins_code	char[]

12	insersion code2	char[]	32	pdbx_ptnr3_label_atom_id	char[]
13	対称性情報 1	int	33	pdbx_ptnr3_label_seq_id	char[]
14	対称性情報 2	int	34	pdbx_ptnr3_label_comp_id	char[]
15	結合距離	float	35	pdbx_ptnr3_label_asym_id	char[]
16	ptnrl_symmetry	char[]	36	pdbx_ptnr3_label_alt_id	char[]
17	ptnr2_symmetry	char[]	37	pdbx_ptnr3_pdb_ins_code	char[]
18	id	char[]	38	details	char[]
19	conn_type_id	char[]	39	pdbx_value_order	char[]
20	pdbx_pdb_id	char[]	40	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## ③修飾アミノ酸/核酸情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	pdbid	char[]	7	auth_asym_id	char[]
2	id	char[]	8	auth_seq_id	char[]
3	label_comp_id	char[]	9	pdb_ins_code	char[]
4	label_asym_id	char[]	10	parentcomp_id	char[]
5	label_seq_id	char[]	11	details	char[]
6	auth_comp_id	char[]	12	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ

## ④分子情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	原子数	int	3	自己参照構造体ポインタ	構造体ポインタ
2	原子情報構造体へのポインタ	構造体ポインタ			

## ⑤分子系情報保存構造体

No.	項目	変数型	No.	項目	変数型
1	分子情報保存構造	構造体ポインタ	3	系全体の原子数	int

	体へのポインタ				
2	pdbID	char []			

## 5. トポロジーファイルフォーマット

以下、トポロジーファイルのフォーマットについて示す。

### a) 共通の書式

トポロジーファイルは以下のフォーマットを満たすものとする。

- a-1) 各行は 80 文字(半角英数字)以内であること。
- a-2) 各行において、';'の後ろはコメントとみなす。
- a-3) 空白行が無内容として許される。プログラムはこの行の内容を無視する。
- a-4) Blank ' ' 又は comma ', ' が、各情報の切れ目となる。
- a-5) 各行のコメント領域でない位置にある '-' は、次の行に継続することを表す。  
このマーク移行の内容は無視される。継続行全体で 8000 文字以内が 1 レコード長とする。
- a-6) 行の先頭の ' TPL> (key)' は、新たな情報(key)の項目が以下に現れることを示す。
- a-7) 項目の順番は決まっているが、その書式は free format で書かれる。
- a-8) (key) 名称のみ大文字英字で定義される。その他は小文字も利用できるが、残基名等  
トポロジーDB と合致している必要がある。

### b) 情報のタイプ

全部で 9 種類のタイプがある。

- b-1) タイトル情報 (1)
- b-2) 分子名情報 (2)
- b-3) 原子情報 (3)
- b-4) 共有結合情報 (4)
- b-5) 共有結合角情報 (4)
- b-6) 内部回転角情報 (4)
- b-7) インプロパー内部回転角情報 (4)
- b-8) 非共有結合関数情報 (2)
- b-9) 非共有結合情報 (2)

注：

タイプ(1)はオプションとして用いる(空白でも可)。

タイプ(2)の情報は必須。

タイプ(3)の情報は、分子毎にそれぞれ必要

タイプ(4)は、単原子分子の場合には無くとも良いが、力場のパラメータが書かれる。



上記の項目は、分子毎に、この順番に出現する必要がある。

複数の分子からなる系の場合には、b-1)～b-7)の項目が、分子毎に繰り返し記される。

### c)例と書式の説明

水中のアラニン・ダイマーについての例を以下に記し、それをもとに項目を説明する。

#### c-1)タイトル情報

TITLE はコメントを表す。タイトル行は 10 行以内とする。

```
TPL> TITLE
```

```
Alanine dimer (AMBER all atom)
```

```
Water (TIP3P-model) for AMBER all-atom
```

#### c-2)分子名情報

ユーザが任意に命名する分子(チェーン)の名称とその分子の総チェーン数。

```
TPL> MOLECULES
```

```
ALA-DIMER-1 1
```

```
WATER(TIP3P-MODEL)-2 449
```

- ； 上記の例では、分子“ALA-DIMER-1”の1つのチェーンだけからなり、その他に、
- ； 分子“WATER(TIP3P-MODEL)-2”が449のチェーンからなっている。
- ； つまり、アラニン・ダイマーが1分子と、TIP3Pの水分子モデルが449分子ある。
- ； 1つのチェーンは、他のチェーンと共有結合を形成していない単位と定義される。
- ； 分子“ALA-DIMER-1”の1つのチェーンは2残基からなり、
- ； 分子“WATER(TIP3P-MODEL)-2”の1つのチェーンは1残基からなり、
- ； 3つの原子で構成される。(下記のATOMSの項参照。)
- ； 分子名は大文字である必要はない。任意の文字が利用できる。

#### c-3)原子情報

原子名

<原子名は8文字(英数字)以内とする。>

非共有結合相互作用のための原子タイプ名

<原子タイプ名は4文字(英数字)以内とする>

非共有結合相互作用のための原子タイプ番号

残基名

<残基名は 8 文字（英数字）以内とする>

残基番号

質量数: g/mol

van der Waals 半径 : angstrom

部分電荷 : electron unit

1-2 相互作用（共有結合を構成する）の相手の原子の総数

1-3 相互作用（共有結合角を構成する）の相手の原子の総数

1-4 相互作用（内部回転角を構成する）の相手の原子の総数

自身を元にした 1-2, 1-3, 1-4 相互作用を行う相手の原子の相対原子順番号

<上記相互作用の相手は、自身の原子順番号より後ろの順番号のものだけ>

共有結合をする相手の相対原子順番号

共有結合角を構成する相手の相対原子順番号

内部回転角を構成する相手の相対原子順番号

内部回転角の基準をとる相手の相対原子順番号（0 の場合には基準がないものとする。）

共有結合長の値 (angstrom)

共有結合角の値 (度)

内部回転角の値 (度)

TPL> ATOMS

ALA-DIMER-1 ; <--- 分子名（上記項目 c-2 で定義された名称）

; NUMBER OF ATOMS = 23

```
N      N3      14 ALA          1  14.0100    1.8500   -0.2630  4  3  5 -> ; 1
      1      2      3      4      5      6      10      7      8      9 ->
      11     12                                     ->
```

; <--- 原子名 N をもつ原子は N3 という原子タイプ名であり、その原子タイプ番号

; は 14 である。また、残基名 ALA を構成する原子であり、残基番号は 1 である。

; 質量は 14.010、van der Waals 半径として 1.850 を持ち、-0.263 の部分電荷(e)を

; もつ。この原子が共有結合する相互作用の相手は 1-2 が 4 原子、1-3 が 3 原子、1-4 が

; 5 原子である。

; (いずれも、この原子よりも大きな相対原子順番号を持つ原子のみとする。)

; 1-2 相互作用するのは、相対原子順番号で 1, 2, 3, 4 のもの、すなわち絶対原子順

; 番号が 2 (HT1), 3 (HT2), 4 (HT3), 5 (CA) の 4 原子である。 1-3 相互作用も同様に

; 5, 6, 10 の原子と、1-4 相互作用は 7, 8, 9, 11, 12 の原子と行われることが示さ

```
; れる。
      0      0      0      0      0.0000    0.0000    0.0000
```

; <--- この行は無視される。

; (この行が無くとも問題はない。)

```
H1      H3      8 ALA      1  1.0080  1.0000  0.3120  0  3  3 -> ; 2
      1      2      3      4      5      9
      -1     3      9      0      1.0100 109.5000 180.0000
```

; <--- この原子 (相対原子順番号は 2) から相対原子順番号-1 の原子、すなわち  
; 1 番目の原子 N と共有結合しており、1.01 Å の共有結合長をもつ。また、相対原子  
; 順番号 3 の原子、すなわち 5 番目の原子 CA と共有結合角 (H1-N-CA) をなし、その  
; 共有結合角が 109.5 度である。さらに、相対原子順番号 9 の原子、すなわち 11 番目  
; の原子 C と内部回転角 (H1-N-CA-C) をなし、その角度 180 度となる。

```
H2      H3      8 ALA      1  1.0080  1.0000  0.3120  0  2  3 -> ; 3
      1      2      3      4      8
      -2     2      8     -1      1.0100 109.5000 -60.0000
```

; <--- この原子 (相対原子順番号は 3) から相対原子順番号 -2, 2, 8 の原子 (N, CA, C)  
; とそれぞれ共有結合 (H2-N)、共有結合角 (H2-N-CA)、内部回転角 (H2-N-CA-C) を構成  
; し、特に内部回転角の基準となる原子は、相対原子順番号が-1 すなわち絶対番号で  
; 2 となる H1 原子を基準とする。H1 の場合に 180 度であり、-60 はその 180 度に対す  
; る相対値 (240 度だけ少ない) として指定される。

```
H3      H3      8 ALA      1  1.0080  1.0000  0.3120  0  1  3 -> ; 4
      1      2      3      7
      -3     1      7     -2      1.0100 109.5000 60.0000
```

; <--- この原子 (相対原子順番号は 4) から相対原子順番号 -3, 1, 7 の原子 (N, CA, C)  
; とそれぞれ共有結合 (H3-N)、共有結合角 (H3-N-CA)、内部回転角 (H3-N-CA-C) を構成  
; し、特に内部回転角の基準となる原子は、相対原子順番号が-2 すなわち絶対番号で 2  
; となる H1 原子を基準とする。H1 の場合に 180 度であり、60 はその 180 度に対する  
; 相対値 (120 度だけ少ない) として指定される。

```
CA      CT      5 ALA      1 12.0100  1.8000  0.1510  3  5  2 -> ; 5
      1      2      6      3      4      5      7      8      9      10 ->
      -4     0      0      0      1.4710  0.0000  0.0000
```

```
HA      HC      9 ALA      1  1.0080  1.5400  0.0480  0  2  5 -> ; 6
      1      5      2      3      4      6      7
      -1     -5     5      1      1.0900 109.5000 120.0000
```

```
CB      CT      5 ALA      1 12.0100  1.8000  -0.0980  3  1  2 -> ; 7
      1      2      3      4      5      6
      -2     -6     4      0      1.5260 111.2000 -120.0000
```

```
HB1     HC      9 ALA      1  1.0080  1.5400  0.0380  0  2  1 -> ; 8
```

	1	2	3									->
	-1	-3	-7	0	1.0900	109.5000	60.0000					
HB2	HC	9	ALA	1	1.0080	1.5400	0.0380	0	1	1		-> ; 9
	1	2										->
	-2	-4	-8	-1	1.0900	109.5000	180.0000					
HB3	HC	9	ALA	1	1.0080	1.5400	0.0380	0	0	1		-> ; 10
	1											->
	-3	-5	-9	-2	1.0900	109.5000	-60.0000					
C	C	1	ALA	1	12.0100	1.8500	0.6160	2	2	3		-> ; 11
	1	2	3	4	5	6	10					->
	-6	-10	0	0	1.5220	111.2000	0.0000					
O	O	18	ALA	1	16.0000	1.6000	-0.5040	0	1	2		-> ; 12
	1	2	3									->
	-1	-7	-11	1	1.2290	120.4000	0.0000					
N	N	13	ALA	2	14.0100	1.7500	-0.4630	2	3	5		-> ; 13
	1	2	3	4	8	5	6	7	9	10		->
	-2	-8	-12	0	1.3350	116.6000	180.0000					
H	H	6	ALA	2	1.0080	1.0000	0.2520	0	1	3		-> ; 14
	1	2	3	7								->
	-1	-3	-9	1	1.0100	119.8000	0.0000					
CA	CT	5	ALA	2	12.0100	1.8000	0.0350	3	5	0		-> ; 15
	1	2	6	3	4	5	7	8				->
	-2	-4	-10	0	1.4490	121.9000	180.0000					
HA	HC	9	ALA	2	1.0080	1.5400	0.0480	0	2	5		-> ; 16
	1	5	2	3	4	6	7					->
	-1	-3	-5	5	1.0900	109.5000	-60.0000					
CB	CT	5	ALA	2	12.0100	1.8000	-0.0980	3	1	2		-> ; 17
	1	2	3	4	5	6						->
	-2	-4	-6	4	1.5260	109.7000	60.0000					
HB1	HC	9	ALA	2	1.0080	1.5400	0.0380	0	2	1		-> ; 18
	1	2	3									->
	-1	-3	-5	0	1.0900	109.5000	60.0000					
HB2	HC	9	ALA	2	1.0080	1.5400	0.0380	0	1	1		-> ; 19
	1	2										->
	-2	-4	-6	-1	1.0900	109.5000	180.0000					
HB3	HC	9	ALA	2	1.0080	1.5400	0.0380	0	0	1		-> ; 20

```

1                                     ->
-3    -5    -7    -2    1.0900  109.5000 -60.0000
C      C      1 ALA      2    12.0100    1.8500  0.5240  2  0  0 -> ; 21
1      2                                     ->
-6    -8    -10    0    1.5220  110.1000 180.0000
O      O2     19 ALA     2    16.0000    1.6000 -0.7060  0  1  0 -> ; 22
1                                     ->
-1    -7    -9    0    1.2500  117.0000  0.0000
OXT   O2     19 ALA     2    16.0000    1.6000 -0.7060  0  0  0 -> ; 23
; <--- 1-2, 1-3, 1-4 の相互作用原子の総数が0 の場合相手原子の相対原子順番号
; リストは表示されない。
-2    -8    -10    -1    1.2500  117.0000 180.0000

```

TPL> ATOMS

WATER(TIP3P-MODEL)-2 ; <--- 水分子の分子名

; 原子情報の出現は、分子名情報

; TPL> MOLECULES における順番に従う。

```

O      OW      25 WAT      1    16.000    1.600  -0.834  2  0  0 ->; 1
1      2                                     ->
0      0      0      0      0.000    0.000  0.000
H1     HW      26 WAT      1    1.008    1.000  0.417  1  0  0 ->; 2
1                                     ->
-1     0      0      0      0.957    0.000  0.000
H2     HW      26 WAT      1    1.008    1.000  0.417  0  0  0

```

c-4) 共有結合情報

共有結合を形成する原子の絶対順番号 i, j

力場定数  $K_{bij}$  : kcal/(mol\*angstroms\*angstroms)

共有結合の平衡結合長  $b_{0ij}$  : angstroms

$$E_{bond}(i, j) = K_{bij} * ((rij - b_{0ij})^{**2})$$

$E_{bond}(i, j)$  : 共有結合エネルギー

$rij$  : i, j間の距離

TPL> BONDS

ALA-DIMER-1 ; <--- 分子名 (上記項目 c-2 で定義された名称)

; NUMBER OF BONDS = 22

```

1      2      434.000000      1.0100000 ; 1
;      原子 1 (N) と原子 2 (H1) との間に力場定数 434.3 で、平衡値 1.01 A
;      の共有結合がある。

```

```

1      3      434.000000      1.0100000 ; 2
1      4      434.000000      1.0100000 ; 3
1      5      367.000000      1.4710000 ; 4
5      6      331.000000      1.0900000 ; 5
5      7      310.000000      1.5260000 ; 6
5      11     317.000000      1.5220000 ; 7
7      8      331.000000      1.0900000 ; 8
7      9      331.000000      1.0900000 ; 9
7      10     331.000000      1.0900000 ; 10
11     12     570.000000      1.2290000 ; 11
11     13     490.000000      1.3350000 ; 12
13     14     434.000000      1.0100000 ; 13
13     15     337.000000      1.4490000 ; 14
15     16     331.000000      1.0900000 ; 15
15     17     310.000000      1.5260000 ; 16
15     21     317.000000      1.5220000 ; 17
17     18     331.000000      1.0900000 ; 18
17     19     331.000000      1.0900000 ; 19
17     20     331.000000      1.0900000 ; 20
21     22     656.000000      1.2500000 ; 21
21     23     656.000000      1.2500000 ; 22

```

TPL> BONDS

WATER(TIP3P-MODEL)-2

; NUMBER OF BONDS = 3

```

1      2      553.000000      0.9572000 ; 1
1      3      553.000000      0.9572000 ; 2
2      3      553.000000      1.5136000 ; 3

```

c-5) 共有結合角情報

共有結合角を形成する原子の絶対順番号 i, j, k

力場定数 Kaijk : kcal/(mol\*radian\*radian)

共有結合の平衡結合長 a0ijk : degree

$$E_{\text{angl}}(i, j, k) = K_{\text{aijk}} * ( ( a_{\text{ijk}} - a_{0\text{ijk}} ) ** 2 )$$

$E_{\text{angl}}(i, j)$  : 共有結合角エネルギー

$a_{\text{ijk}}$  :  $i, j, k$  がなす角度

TPL> ANGLES

ALA-DIMER-1 ; <--- 分子名

; NUMBER OF ANGLES = 39

2 1 3 35.0000000 109.5000000 ; 1

; <--- 絶対原子順番号 2-1-3 (H1-N-H2) で構成される角度

; (原子 2 (N) は角度の中心)

; 力場定数は 35 kcal/mol.

; 共有結合角の平衡値 は 109.5 度。

2	1	3	35.0000000	109.5000000 ; 1
2	1	4	35.0000000	109.5000000 ; 2
2	1	5	35.0000000	109.5000000 ; 3
3	1	4	35.0000000	109.5000000 ; 4
3	1	5	35.0000000	109.5000000 ; 5
4	1	5	35.0000000	109.5000000 ; 6
1	5	6	35.0000000	109.5000000 ; 7
1	5	7	80.0000000	111.2000000 ; 8
1	5	11	80.0000000	111.2000000 ; 9
6	5	7	35.0000000	109.5000000 ; 10
6	5	11	35.0000000	109.5000000 ; 11
7	5	11	63.0000000	111.1000000 ; 12
5	7	8	35.0000000	109.5000000 ; 13
5	7	9	35.0000000	109.5000000 ; 14
5	7	10	35.0000000	109.5000000 ; 15
8	7	9	35.0000000	109.5000000 ; 16
8	7	10	35.0000000	109.5000000 ; 17
9	7	10	35.0000000	109.5000000 ; 18
5	11	12	80.0000000	120.4000000 ; 19
5	11	13	70.0000000	116.6000000 ; 20
12	11	13	80.0000000	122.9000000 ; 21
11	13	14	35.0000000	119.8000000 ; 22
11	13	15	50.0000000	121.9000000 ; 23
14	13	15	38.0000000	118.4000000 ; 24

13	15	16	35.000000	109.500000 ; 25
13	15	17	80.000000	109.700000 ; 26
13	15	21	63.000000	110.100000 ; 27
16	15	17	35.000000	109.500000 ; 28
16	15	21	35.000000	109.500000 ; 29
17	15	21	63.000000	111.100000 ; 30
15	17	18	35.000000	109.500000 ; 31
15	17	19	35.000000	109.500000 ; 32
15	17	20	35.000000	109.500000 ; 33
18	17	19	35.000000	109.500000 ; 34
18	17	20	35.000000	109.500000 ; 35
19	17	20	35.000000	109.500000 ; 36
15	21	22	70.000000	117.000000 ; 37
15	21	23	70.000000	117.000000 ; 38
22	21	23	80.000000	126.000000 ; 39

； <--- TIP3P 水分子には angle energy がないため、  
 ； "WATER(TIP3P-MODEL)-2"に対する共有結合角情報は無い。

## c-6) 内部回転角情報

内部回転角を形成する原子の絶対順番号 i, j, k, l

力場定数 Ktijkl : kcal/mol

同一の共有結合の周りにおける内部回転角の総数 Ntijkl

2\*pi を単位とした回転対称の数 Nsijkl

位相 Tijkl

1-4 相互作用における非共有結合のカウントのためのフラグ

1 の時には、1-4 の非共有結合エネルギーを計算する。

$$Etors(i, j, k, l) = ( Ktijkl / Ntijkl ) * \cos( ( Nsijkl * Tijkl ) + Tijkl )$$

Etors(i, j, k, l) : 内部回転角エネルギー

Tijkl : 内部回転角

TPL> TORSIONS

ALA-DIMER-1 ; <--- 分子名

； NUMBER OF TORSIONS = 50

2	1	5	6	1.4000	9	3	0.0000	1 ; 1
---	---	---	---	--------	---	---	--------	-------

； <--- 内部回転角は絶対原子順番号の原子 2-1-5-6 (H1-N-CA-HA)

； で定義され、力場定数 1.4 kcal/mol である。



- ; 同一の共有結合 1-5 (N-CA)の周りにおける内部回転角の総数  
 ; Ntijkl は 9 ヶである。対称数は 3 であり 120 度  
 ; (360/3 度)ずつの回転で同一の値となる。  
 ; 位相は 0.0 度で、0, 120, 240 度が安定である。  
 ; 原子 2 (H1) と 6 (HA) との間の 1-4 非共有結合の相互作用は  
 ; 計算される。

2	1	5	7	1.4000	9	3	0.0000	1 ; 2
2	1	5	11	1.4000	9	3	0.0000	1 ; 3
3	1	5	6	1.4000	9	3	0.0000	1 ; 4
3	1	5	7	1.4000	9	3	0.0000	1 ; 5
3	1	5	11	1.4000	9	3	0.0000	1 ; 6
4	1	5	6	1.4000	9	3	0.0000	1 ; 7
4	1	5	7	1.4000	9	3	0.0000	1 ; 8
4	1	5	11	1.4000	9	3	0.0000	1 ; 9
1	5	7	8	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 10
1	5	7	9	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 11
1	5	7	10	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 12
6	5	7	8	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 13
6	5	7	9	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 14
6	5	7	10	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 15
8	7	5	11	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 16
9	7	5	11	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 17
10	7	5	11	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 18
1	5	11	12	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 19
1	5	11	13	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 20
7	5	11	12	0.0670	1	3	180.0000	1 ; 21
7	5	11	13	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 22
6	5	11	12	0.0670	1	3	180.0000	1 ; 23
6	5	11	13	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 24
5	11	13	14	10.0000	4	2	180.0000	1 ; 25
5	11	13	15	10.0000	4	2	180.0000	1 ; 26
12	11	13	14	2.5000	1	2	180.0000	1 ; 27
12	11	13	14	0.6500	1	1	0.0000	0 ; 28
12	11	13	15	10.0000	4	2	180.0000	1 ; 29
11	13	15	16	0.0000	6	3	0.0000	1 ; 30
11	13	15	17	0.0000	6	3	0.0000	1 ; 31

11	13	15	21	0.0000	6	3	0.0000	1 ; 32
14	13	15	16	0.0000	6	3	0.0000	1 ; 33
14	13	15	17	0.0000	6	3	0.0000	1 ; 34
14	13	15	21	0.0000	6	3	0.0000	1 ; 35
13	15	17	18	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 36
13	15	17	19	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 37
13	15	17	20	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 38
16	15	17	18	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 39
16	15	17	19	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 40
16	15	17	20	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 41
18	17	15	21	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 42
19	17	15	21	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 43
20	17	15	21	1.3000	9	3	0.0000	1 ; 44
13	15	21	22	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 45
13	15	21	23	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 46
16	15	21	22	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 47
16	15	21	23	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 48
17	15	21	22	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 49
17	15	21	23	0.0000	6	2	0.0000	1 ; 50

## c-7) インプロパー内部回転角情報

この項目の書式と内容は内部回転角情報 (c-6) に準ずる。

TPL> IMPROPER-TORSIONS

ALA-DIMER-1

; NUMBER OF IMPROPER-TORSIONS = 3

11	15	13	14	1.0000	1	2	180.0000	0 ; 1
5	13	11	12	10.5000	1	2	180.0000	0 ; 2
15	23	21	22	10.5000	1	2	180.0000	0 ; 3

## c-8) 非共有結合の関数情報

非共有結合を表す関数をこの項目で宣言する。

AMBER-like functions, OPLS-like function, CHARMM-like function 等が利用できる。

関数番号

この関数で使用するパラメータ総数

関数の名称 <40 文字 (英数字) 以内とする>

TPL> FUNCTIONS

1	4	LENNARD-JONES-AMBER
2	2	H-BONDING-AMBER

c-9) 非共有結合情報

非共有結合で用いるパラメータが記述される。

この例では、van der Waals ポテンシャルと水素結合ポテンシャルの2つがある。

\*) van der Waals ポテンシャルのためのパラメータ

非共有結合を決める原子タイプ番号 i

関数タイプ番号 (この例では項目 c-8 によって 1 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

$E_{vdw}(i, j) = RV_{ij} * ( ( A_{ij} / r_{ij}^{12} ) - ( B_{ij} / r_{ij}^6 ) )$

$E_{vdw}(i, j)$  : 原子タイプ i, j 間の van der Waals エネルギー

RVij : 1-4 van der Waals エネルギーのためのパラメータ

RVij = 1.0 (1-5 相互作用の場合)

RVij = MIN( RVi, RVj )

Aij : kcal/(mol\*(a\*\*12))