

myPresto 5.0

- EditMol -

USER MANUAL

2018/1/11

本ドキュメントについて

本ドキュメントは、「**myPresto 5.0 USER MANUAL**」の別冊です。コピーライト、プログラム使用許諾条件、著者および引用文献については、「**myPresto 5.0 USER MANUAL**」の記述に準じます。

謝辞

本ソフトウェアの研究開発は、国立研究開発法人日本医療研究開発機構(AMED)の 援助によって行われました。ここに感謝の意を記します。

本ソフトウェアは、故・京極好正博士の始められた研究の中で開発されました。

目次

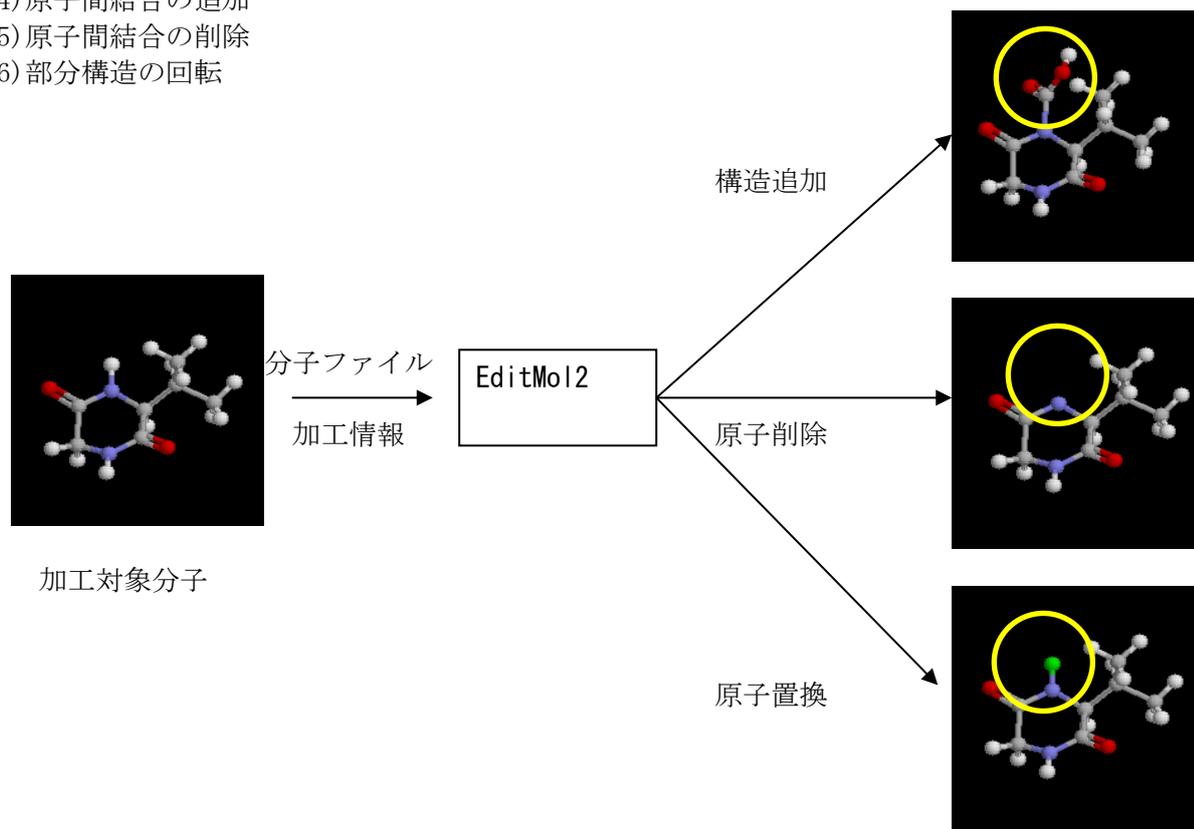
1. はじめに	4
2. EditMol のインストール	5
2.1. インストール方法	5
2.2. テストプログラムの実行	5
3. EditMol の使用方法.....	6
3.1. EditMol の実行コマンド	6
3.2. EditMol の入力.....	6
3.3. EditMol の出力.....	7
4. サンプルの実行方法.....	8
4.1. 原子の追加	10
4.2. 原子の削除	11
4.3. 原子の置換	12
4.4. 結合の追加	13
4.5. 結合の削除	14
4.6. 結合の回転.....	15

1. はじめに

EditMol は、分子合成プログラム Bind_Mol2 をベースとし、ユーザーが指定した操作で分子を加工するプログラムです。

EditMol では、コマンドラインで加工情報を入力することにより、下記の操作を行います。

- (1) 末端原子への構造の追加
- (2) 指定原子の削除
- (3) 指定原子の置換
- (4) 原子間結合の追加
- (5) 原子間結合の削除
- (6) 部分構造の回転



EditMol で加工した分子は加工前の原子タイプと電荷が割り当てられています。

MD等の入力として使用する場合は、myPrestoのツールであるHgeneを使用し、正しい原子タイプと電荷を設定して下さい。

2. EditMol のインストール

本章では EditMol のインストール方法について説明します。

2.1. インストール方法

EditMol_YYMMDD.tar.gz を、ユーザーが書き込み可能なディレクトリに配置してから、以下のコマンドを実行してください。(YYMMDD には年月日を示す数字が入ります。) インストールには、GNU の FORTRAN コンパイラ(gfortran)もしくは、Intel の FORTRAN コンパイラ(ifort)が必要です。

```
% tar -xzvf EditMol_YYMMDD.tar.gz
% cd EditMol_YYMMDD
```

次のコマンドは、どちらか一方を実行します。

```
% bin/install.sh          (GNU のコンパイラを使用する場合)
% bin/install.sh intel    (Intel のコンパイラを使用する場合)
```

2.2. テストプログラムの実行

次のコマンドで EditMol のテストプログラムを実行できます。

```
% bin/test_EditMol.sh
```

このコマンドを実行すると、sample/に格納されているファイルを使用して、テスト計算を開始します。出力先は、test_EditMol_sample/です。このコマンドを実行することにより、サンプルデータに対して、EditMol が適切に動作することを確認することができます。

3. EditMol の使用方法

3.1. EditMol の実行コマンド

EditMol は "EditMol" コマンドで起動し、標準入力から 3 行のデータを入力し、分子加工を実行します。

標準入力の代わりに、3 行のファイルを作成し、このファイルをリダイレクションで入力しても同様の結果が得られます。

3.2. EditMol の入力

EditMol の入力は 1 行目が加工対象分子の mol2 ファイル名、2 行目が加工種別、3 行目が加工情報です。

加工対象分子の mol2 ファイル名
加工種別
加工情報

下記の表のようにそれぞれの加工種別に応じて、加工情報は異なります。

項番	加工内容	加工種別のキーワード	加工情報
1	原子追加*1	add_atom	対象原子 ID 構造名
2	原子削除*2	del_atom	削除原子 ID
3	原子置換	chg_atom	置換原子 ID 置換後の元素名
4	結合追加*3	add_bond	対象原子 ID1 対象原子 ID2 結合次数
5	結合削除	del_bond	対象原子 ID1 対象原子 ID2
6	構造回転*4	rot_bond	対象原子 ID1 対象原子 ID2 回転角

*1 原子追加では、対象原子が水素の場合は水素原子の位置に構造を追加します。対象原子が重原子(水素以外の場合)は、結合する水素の位置に構造を追加します。

*2 原子削除では重原子を削除した場合、分子は複数の分子に分かれる場合があります。

*3 既に結合が存在する 2 原子を指定した場合、結合次数のみ変化します。

*4 指定した 2 原子の結合を軸に対象原子 ID2 以降の構造が指定した角度で回転を行います。

3.3.EditMol の出力

EditMol2 は、実行ディレクトリに output.mol2 の名称で加工した分子を出力します。出力ファイルには加工した内容が先頭文字“#”の行で表示されます。また、原子追加の場合には元の原子の構造名は“SS”、追加した原子の構造名は“C01”で出力します。

```
@<TRIPOS>MOLECULE
output.mol2
 26 26 0 0 0
SMALL
USER_CHARGES

# EDITMOL COMMAND  add atomH13          13
@<TRIPOS>ATOM
 1  C2      0.4020  1.3510  -0.6140  C.2      1  SS      0.2897
 2  O6      1.3700  1.6910  -1.3440  O.2      1  SS     -0.3654
 3  N4     -0.8100  1.9420  -0.8250  N.pl3    1  SS     -0.3876
 4  H14    -0.8934  2.6319  -1.5579  H        1  SS      0.2552
 5  C7     -1.9827  1.5929  -0.0102  C.3      1  SS     -0.0271
 6  H16    -2.9009  1.7436  -0.5779  H        1  SS      0.1310
 7  H15    -1.9942  2.1868  0.9033  H        1  SS      0.1053
 8  C5     -1.9577  0.1353  0.4192  C.2      1  SS      0.2798
 9  O8     -3.0118  -0.5414  0.5413  O.2      1  SS     -0.3667
10  N1     -0.7467  -0.4396  0.6682  N.pl3    1  SS     -0.3854
11  C      -0.7031  -1.8776  1.0929  C.2      1  C01      0.2919
12  O      -1.2650  -2.2262  2.1045  O.co2    1  C01     -0.2548
13  O      -0.0420  -2.7741  0.3521  O.co2    1  C01     -0.4828
14  H       0.2085  -3.4914  0.9586  H        1  C01      0.2948
15  C3      0.5106  0.3193  0.5288  C.3      1  SS      0.0401
16  H12     0.6307  0.9150  1.4345  H        1  SS      0.1035
17  C9      1.6915  -0.6863  0.4366  C.3      1  SS     -0.0961
18  H17     1.6346  -1.1526  -0.5471  H        1  SS      0.0855
19  C11     1.5699  -1.8330  1.4606  C.3      1  SS     -0.2079
20  H23     0.5857  -2.2944  1.3906  H        1  SS      0.0700
21  H22     1.7208  -1.4760  2.4776  H        1  SS      0.1046
22  H21     2.3211  -2.5937  1.2521  H        1  SS      0.0787
23  C10     3.0777  -0.0165  0.5429  C.3      1  SS     -0.2109
24  H20     3.2031  0.4164  1.5353  H        1  SS      0.0787
25  H19     3.1874  0.7771  -0.1946  H        1  SS      0.0991
26  H18     3.8670  -0.7511  0.3887  H        1  SS      0.0733

@<TRIPOS>BOND
 1  10  15  1
 2  10  8  1
 3  1  15  1
 4  1  3  1
 5  1  2  2
 6  15  17  1
 7  15  16  1
 8  3  5  1
 9  8  5  1
10  8  9  2
11  17  23  1
12  17  19  1
13  3  4  1
14  5  7  1
15  5  6  1
16  17  18  1
17  23  26  1
18  23  25  1
19  23  24  1
20  19  22  1
21  19  21  1
22  19  20  1
23  11  12  2
24  11  13  1
25  13  14  1
26  10  11  1
```

4. サンプルの実行方法

入力サンプルして、骨格分子の mol2 ファイル、もしくは、官能基置換用ファイルのサンプルとして、以下のものを sample/の下に用意しています。

- sample.mol2
- COOH.mol2
- biphenyl.mol2
- divided.mol2
- ring7.mol2

sample.mol2 と COOH.mol2 の例を図 4-1 に示します。COOH.mol2 は末端である H が置換対象となります。

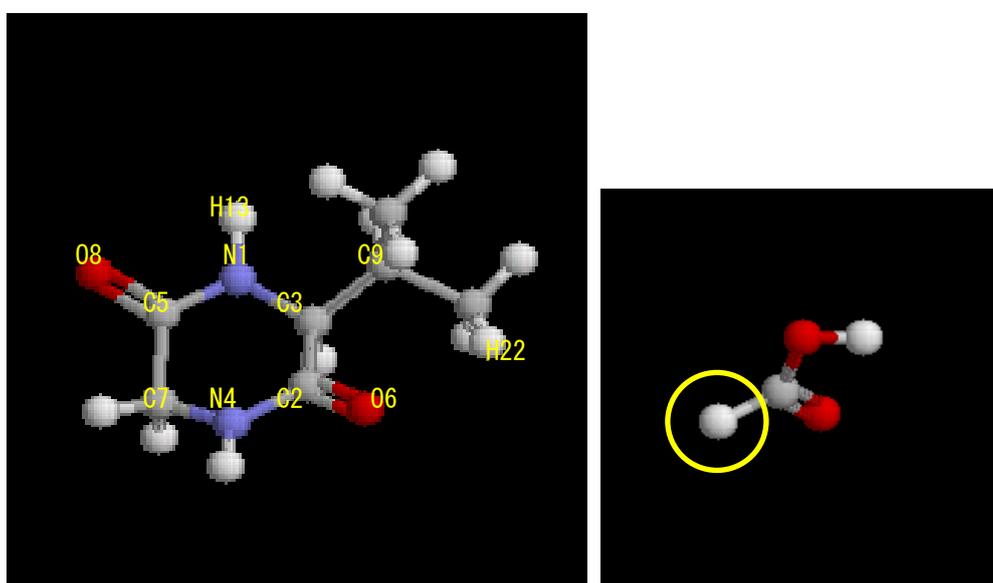


図 4-1. sample.mol2 と COOH.mol2

入力ファイルとして、以下の表のものを用意しています。下記の表では、それぞれの名称が分子加工の内容を示しています。

項番	入力ファイル	加工内容	結果
1	add_atom_H12.inp	H12原子を指定しCOOH.mol2を追加	H13をCOOHに変更
2	add_atom_N1.inp	N1原子を指定しCOOH.mol2を追加	H13をCOOHに変更
3	add_atom_O8_err.inp	O8原子を指定しCOOH.mol2を追加	O8は末端でないのでエラー
4	add_bond_O6_H22.inp	O6とH22に1重結合を追加	O6とH22に結合を追加
5	chg_atom_C2_S.inp	C2をSに変更	C2をSに置換
6	chg_atom_H13_Cl.inp	H13をClに変更	H13をClに置換
7	chg_atom_O8_S.inp	O8をSに変更	O8をSに変更
8	del_atom_C2.inp	C2を削除	二つの分子に変換
9	del_atom_O8.inp	O8を削除	O8を削除
10	del_atom_H13.inp	H13を削除	H13を削除
11	del_bond_C2_N4.inp	C2とN4の結合を削除	C2とN4の結合を削除
12	rot_bond_C3_C9.inp	C3とC9を軸に-120°回転	C3とC9を軸に-120°回転

加えて、以下のインプットファイルも用意しています。

add_bond_C3_N1.inp
 add_bond_C3_C9.inp
 del_bond_C3_C9.inp
 del_hydrogen.inp
 del_hydrogen2.inp
 extract_atom_C1.inp
 extract_atom_N23.inp
 extract_atom_O23.inp
 insert_atom_C10_C1.inp
 insert_atom_C10_C12.inp
 move_atom_N23.inp
 move_mol.inp
 rot_bond_C2_N4.inp
 rot_bond_C9_C3.inp
 rot_mol.inp

4.1.原子の追加

(1)実行コマンド

sample ディレクトリで原子追加を入力とした EditMol を実行すると、下記のログが表示されます。

```
$ ../src/EditMol < add_atom_N1.inp
Input File name (mol2 file)
File =sample.mol2
input command (add_atom, del_atom, chg_atom, add_bond, del_bond)
command =add_atom
input replace atom ID, and replace pattern
replace=C00H
atom=          1  structure= C00H.mol2
Information>
create file name = output.mol2

OUTPUT MOL2 FILE = 1

program is done normally.
```

(2)出力結果

出力ファイルの output.mol2 では H13 の位置に C00H が追加されます。

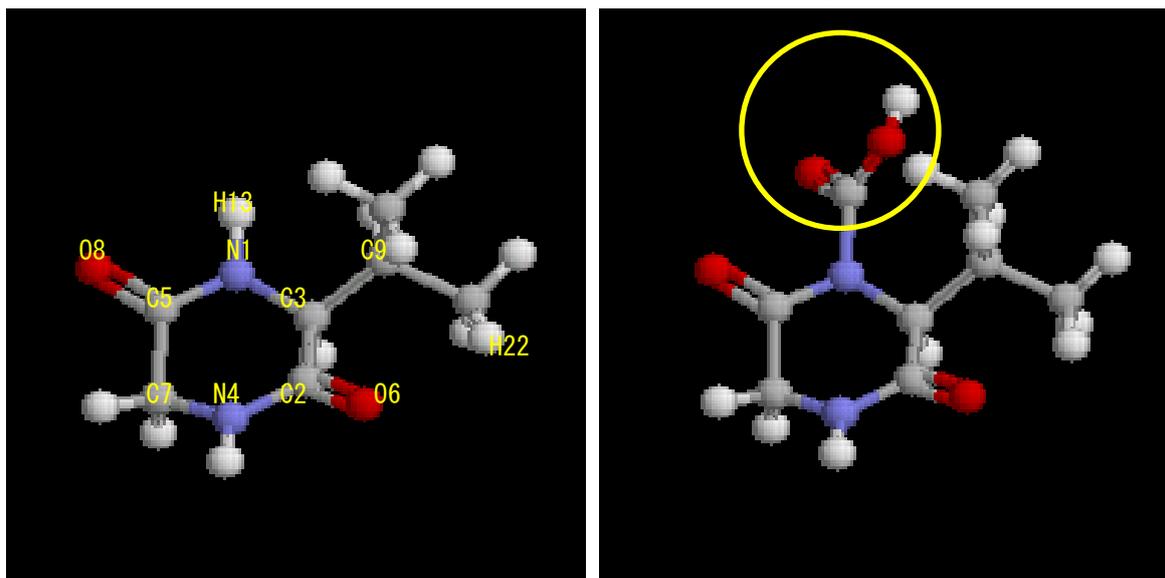


図 4-1. 入力分子と出力分子

4.2. 原子の削除

(1) 実行コマンド

sample ディレクトリで原子削除を入力とした EditMol を実行すると、下記のログが表示されます。

```
$ ../src/EditMol < del_atom_H13.inp
Input File name (mol2 file)
File =sample.mol2
input command (add_atom, del_atom, chg_atom, add_bond, del_bond)
command =del_atom
input delete atom ID
delete atom ID =          13
OUTPUT MOL2 FILE = output.mol2

program is done normally.
```

(2) 出力結果

出力ファイルの output.mol2 では H13 が削除されます。

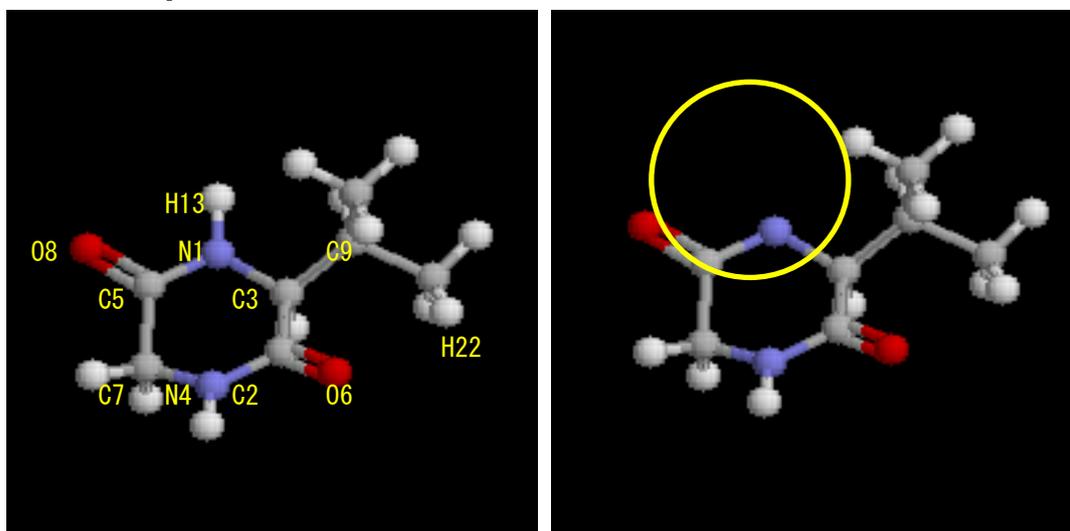


図 4.2-1. 入力分子と出力分子

(3) Hgene 適用結果

Hgene で-h を指定すると同じ位置に水素が付加され、-h 指定なしの場合は水素が付加されません。

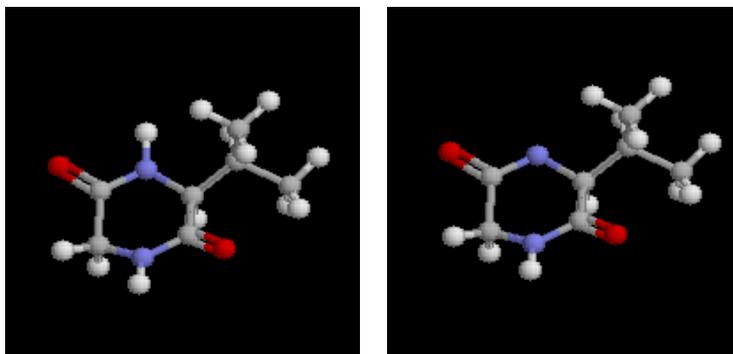


図 4.2-2. -h 付きの Hgene 結果と-h なしの Hgene 結果

4.3.原子の置換

(1)実行コマンド

sample ディレクトリで原子置換を入力とした EditMol を実行すると、下記のログが表示されます。

```
$ ../src/EditMol < chg_atom_H13_Cl.inp
Input File name (mol2 file)
File =sample.mol2
input command (add_atom, del_atom, chg_atom, add_bond, del_bond)
command =chg_atom
input atom ID, and replace atom name
change atom ID=      13 ->Cl
OUTPUT MOL2 FILE  = output.mol2

program is done normally.
```

(2)出力結果

出力ファイルの output.mol2 では H13 が Cl に置換されます。

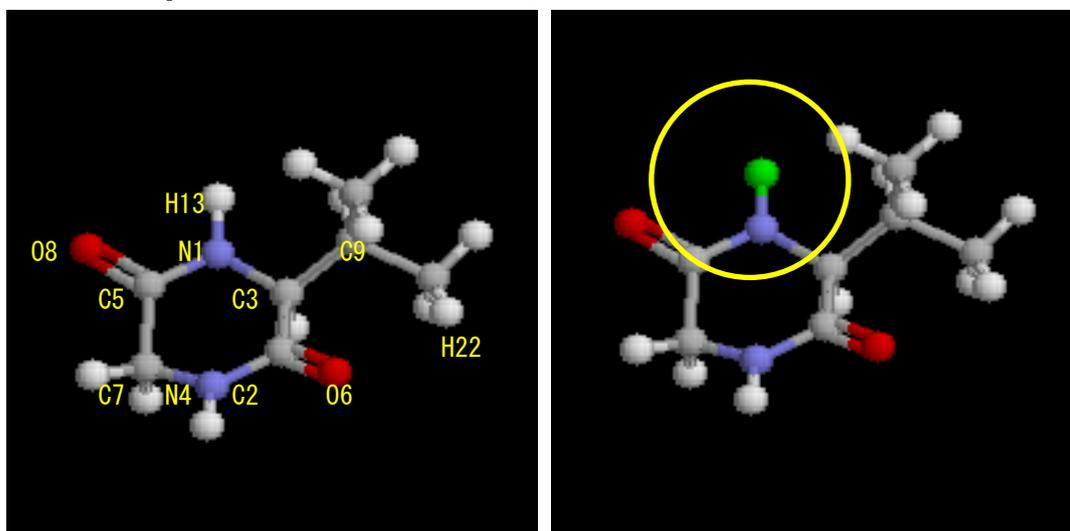


図 4-3. 入力分子と出力分子

(3)Hgene 適用結果

output.mol2 を入力とした-h 指定なしの Hgene は正常に終了しました。(正式名でない"CL"に置換した場合は"program can't set Gasteiger parameter of CL(13)"が出力されます。)

```
$ /disk2/share/myPresto.v4.205/tools/Hgene/bin/Hgene -imol2 output.mol2 -omol2 x.mol2

*****
*                                     *
*           Hgene                     *
*                                     *
*           Aug. 1, 2011                *
*                                     *
*****

program is done normally.
```

4.4. 結合の追加

(1) 実行コマンド

sample ディレクトリで結合追加を入力とした EditMol を実行すると、下記のログが表示されます。

```
$. /src/EditMol < add_bond_06_H22.inp
Input File name (mol2 file)
File =sample.mol2
input command (add_atom, del_atom, chg_atom, add_bond, del_bond)
command =add_bond
input bonded atom ID 1, atom ID 2 and bond order
add bond          6          22 1
OUTPUT MOL2 FILE = output.mol2

program is done normally.
```

(2) 出力結果

出力ファイルの output.mol2 では 06 と H22 に間に結合が追加されます。

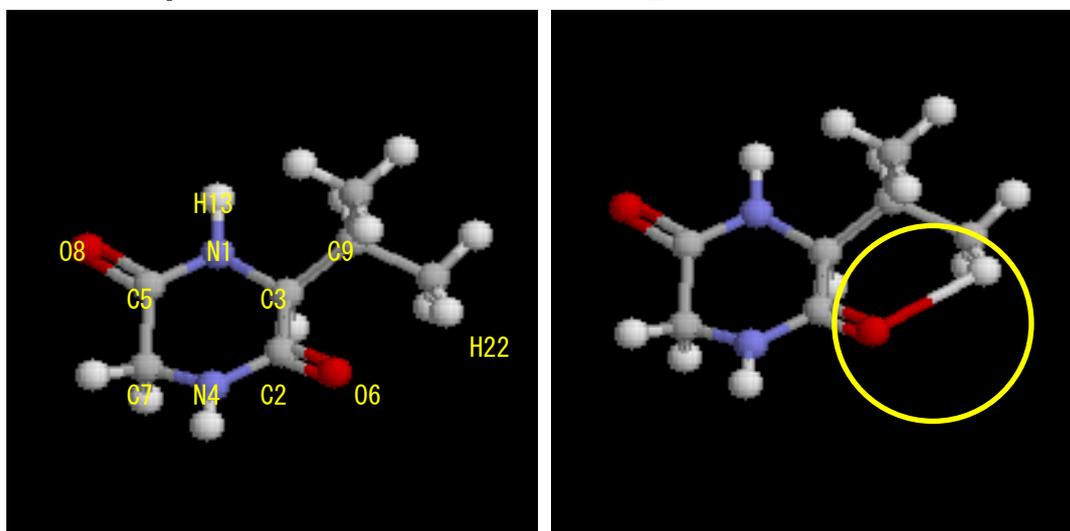


図 4-4. 入力分子と出力分子

(3) Hgene 適用結果

Hgene を適用すると水素が 2 つの結合を持つためエラーとなります。

```
$. /disk2/share/myPresto.v4.205/tools/Hgene/bin/Hgene -imol2 output.mol2 -omol2 x.mol2
:
ERROR> toolSetNumberOfHands
Number of total electron of atom H(22) is wrong.
total_elec : 8
```

06, H22 を結合数が 3 である N に置換するとエラーが解消されます。

```
$. /disk2/share/myPresto.v4.205/tools/Hgene/bin/Hgene -imol2 output.mol2 -omol2 x.mol2
:
program is done normally.
```

4.5. 結合の削除

(1) 実行コマンド

sample ディレクトリで結合削除を入力とした EditMol を実行すると、下記のログが表示されます。

```
$. /src/EditMol < del_bond_C2_N4.inp
Input File name (mol2 file)
File =sample.mol2
input command (add_atom, del_atom, chg_atom, add_bond, del_bond)
command =del_bond
input nonbonded atom ID 1 and atom ID 2
delete bond          2          4
OUTPUT MOL2 FILE   = output.mol2

program is done normally.
```

(2) 出力結果

出力ファイルの output.mol2 では N4 と C2 の結合が削除されます。

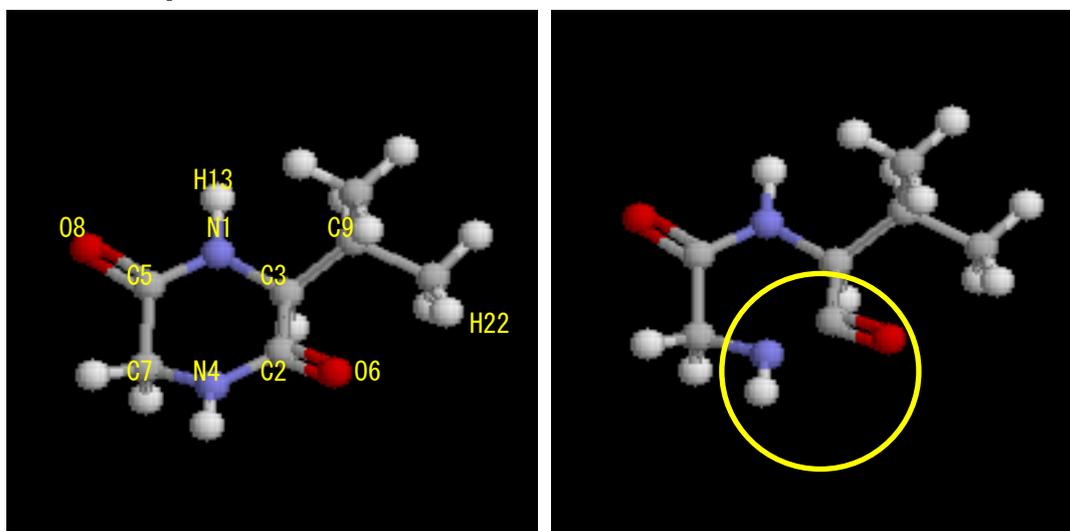


図 4.5-1. 入力分子と出力分子

(3) Hgene 適用結果

Hgene で-h を指定すると C2 に 1 つの水素と N4 に 2 つの水素が付加され (C2 の水素は N4 とほぼ同じ位置)、-h 指定なしの場合は水素が付加されません。

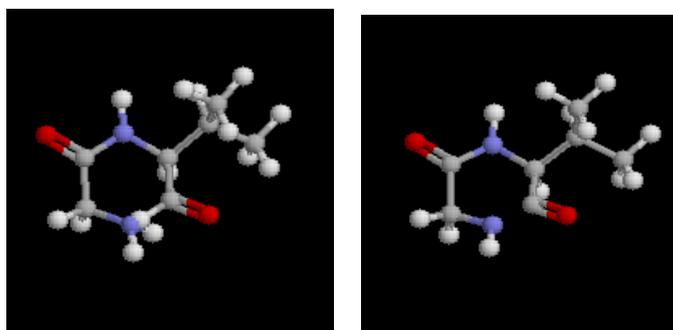


図 4.5-2. -h 付きの Hgene 結果と-h なしの Hgene 結果

4.6. 結合の回転

(1) 実行コマンド

sample ディレクトリで結合回転を入力とした EditMol を実行すると、下記のログが表示されます。

```
$. /src/EditMol < rot_bond_C3_C9.inp
Input File name (mol2 file)
File =
sample.mol2

input command (add_atom, del_atom, chg_atom, add_bond, del_bond, rot_bond)
command =
rot_bond

input bonded atom ID 1, atom ID 2 and phase
rotate bond      3      9  -120.00000
OUTPUT MOL2 FILE = output.mol2

program is done normally.
```

(2) 出力結果

出力ファイルの output.mol2 では C9 以降の構造が -120.0° 回転します。

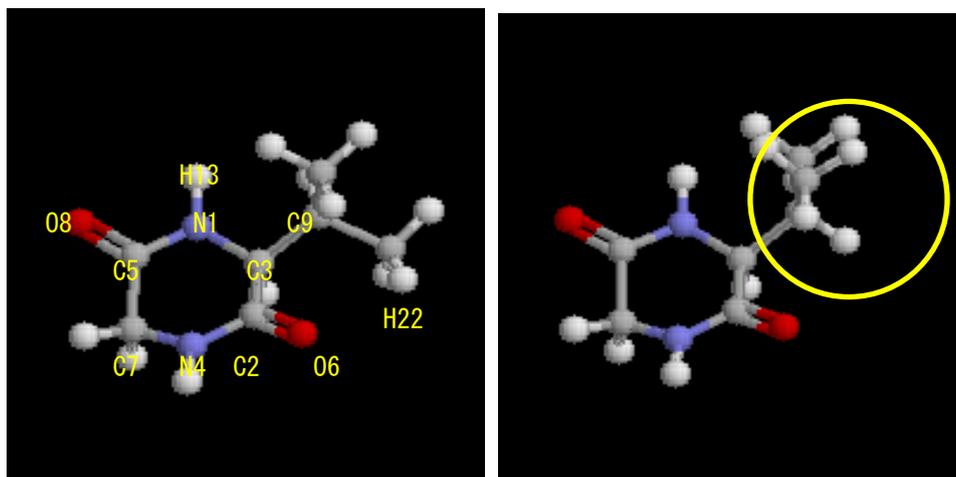


図 4.6-1. 入力分子と出力分子

C3, C9 の原子指定順を入れ替えると下図のように C3 側の構造が回転します。

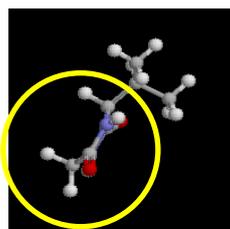


図 4.6-2. C3 側の回転

-以上-