

myPresto 5.0

- Hgene -

USER MANUAL

2018/1/12

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

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.....	1
2. Hgene インストール手順	2
2-1 プログラムの解凍.....	2
2-2 Hgene のコンパイル	2
2-3 Hgene のインストール、及び、削除	3
3. Hgene の使用法	4
4. Hgene の入出力タイプ	5
4-1 入出力ファイルタイプについて.....	5
4-2 ファイル名拡張子について.....	5
4-3 Hgene のオプションについて	5
5. Hgene の計算例	9

1. はじめに

本マニュアルは、myPresto のツールの 1 つである分子座標フォーマット変換ツール(Hgene)について示します。

Hgene は MDL mol、Sybyl mol2、PDB、cif 等の座標フォーマットを変換するツールであり、フォーマット変換機能の他に、酸性、塩基性官能基の解離/非解離状態に対応した水素座標生成機能、原子電荷の割り当て手法の 1 つである Gasteiger 電荷計算機能、簡易的なエネルギー最小化による 3 次元構造の生成機能を有しています。

また、入力ファイルが MDL mol(sdf ファイル)、Sybyl mol2 ファイルの場合にはマルチファイル(1 ファイル中に複数の分子データが含まれるファイル)にも対応しました。

本ツールで作成した各種分子データは、myPresto のサブシステムの、tplgene/tplgeneL、cosgene、sievgene 等で使用されます。

以下に Hgene のインストール方法、使用方法、使用例について示します。

2. Hgene インストール手順

2-1 プログラムの解凍

プログラムは、ファイル名 HgeneXXXX.tar.gz (実際には XXXX は日付が入ります) の形で配布しています。

まず、以下のコマンドで解凍作業を行います(%はコマンドプロンプトを示します。下線部が入力部分です。以下、共通)。

```
%gzip -d HgeneXXXX.tar.gz
%tar xvf HgeneXXXX.tar
```

解凍すると、以下のディレクトリ構成にて、各種ファイルが作成されます。src ディレクトリには、Hgene のソースデータが、sample ディレクトリには Hgene 処理用のサンプルデータが置いています。

```
HgeneXXXX ----+----- src          :Hgene のソースファイル
      |           |
      |           +----- MOPAC7      :MOPAC7 のソースファイル
      |
      +----- sample      :Hgene のサンプルデータ
```

2-2 Hgene のコンパイル

コンパイルを行うには、Makefile の修正が必要となります。HgeneXXXX/src 配下の Makefile を vi などのエディタで、使用する C コンパイラのパス(変数 CC) と実行ファイルをインストールしたいパス(変数 BIN_DIR)を編集します。

なお、C コンパイラは以下のコマンドでパスを知ることができます。

```
%which cc
あるいは、
%which gcc
```

例) C コンパイラが/usr/local/bin/cc にある場合の Makefile の修正

変更前)

```
CC=/usr/bin/cc
```

変更後)

```
CC=/usr/local/bin/cc
```

また、MOPAC 機能をコンパイルするには、gfortran や ifort コンパイラが必要となります。

Makefile を編集した後に、src ディレクトリにおいて以下の様に make コマンドを実行しますと、HgeneXXXX/src 配下に実行ファイルである Hgene が作成されます。

MOPAC 機能も併せてコンパイルする場合：

(gfortran を使用する場合)

```
%make
```

または

(ifort を使用する場合)

```
%make -f Makefiel.intel
```

MOPAC 機能をコンパイルしない場合：

```
%make -f Makefile_NO_MOPAC7
```

2-3 Hgene のインストール、及び、削除

以下のコマンドで、2-2 で指定したパスに Hgene の実行ファイルを作成します。

```
%make install
```

※指定したパスが” /usr/local/bin” 等の、一般ユーザに書き込み権限がない場所にインストールする場合には、root 権限でのインストールが必要となります。

以下のコマンドで Hgene のオブジェクトファイル、実行ファイルを削除します。

```
%make clean
```

3. Hgene の使用法

コマンドラインで以下のように入力すると、指定したフォーマットで入力ファイルを読み込み、出力ファイルを作成します。また、各種オプションを指定する事ができます。

Hgene -i<入力タイプ> <入力ファイル> -o<出力タイプ> <出力ファイル> [オプション]

※<>は必須入力項目、[]は任意の入力項目を示す。

4. Hgene の入出力タイプ

4-1 入出力ファイルタイプについて

Hgene では以下の入出力タイプに対応しています。

<入力タイプ>

mdl : MDL mol ファイル
mol2 : Sybyl mol2 ファイル
pdb : PDB ファイル
cif : cif ファイル

<出力タイプ>

mdl : MDL mol ファイル
mol2 : Sybyl mol2 ファイル
pdb : PDB ファイル
mopprt : mopac dat ファイル

※入力タイプ-icif(入力 cif)を指定した場合は、出力タイプ-opdb(出力 PDB)のみ対応しています。また、水素付加オプション等のオプションには対応していません。

※入力タイプ-imdl、-imol2 を指定した場合には、マルチファイルを指定する事ができます。マルチファイル出力に対応しているのは、-omdl、-mol2、-opdb の3種類になります。

4-2 ファイル名拡張子について

ファイル名には各フォーマットに対応した拡張子をつける必要があります。入出力タイプ毎に以下に示す拡張子以外を指定した場合にはエラーとなります。

-imdl -omdl : MDL mol ファイルの拡張子は”**.sdf**”もしくは”**.mol**”に対応
-imol2 -omol2 : Sybyl mol2 ファイルの拡張子は”**.sm2**”もしくは”**.mol2**”に対応
-ipdb -opdb : PDB ファイルの拡張子は”**.pdb**”に対応
-icif : cif ファイルの拡張子は”**.cif**”に対応
-omopprt : mopac dat ファイルの拡張子は”**.dat**”に対応

4-3 Hgene のオプションについて

各オプションをコマンドライン入力することにより、水素付加、水素付加方法選択、MOPAC 電荷計算、

簡易的なエネルギー最小化等を行うことができます。

-h --hydrogen

: 出力データに、水素の原子情報、結合情報を付加します。後述の-p オプションと同時に指定した場合には、-p オプションが優先され、-p オプションの水素付加形式で水素付加を行います。

※入力ファイルが cif の場合は未対応

-d --delete-hydrogen

: 水素の原子情報、結合情報を削除してファイルを出力します。

-ch --charge

: コマンドラインで入力された-ch の次の引数を分子総電荷値として mopac dat ファイルの一行目に出力します。

※mopac dat ファイルを出力する場合のみ対応、本オプションを指定しない場合にはプログラム内部で計算された分子総電荷値を出力します。

-H -help

: Hgene のヘルプを出力します。

-dc --default-charge

: 入力データに含まれる電荷の値を mol2 ファイルに出力します。本オプションは出力タイプに Sybyl mol2 を指定した場合のみ対応しています。

(本オプションを指定しない場合(デフォルト)には、Gasteiger 電荷計算を行います)

※入力ファイルが Sybyl mol2 の場合、入力データの値をそのまま出力、

入力ファイルが MDL mol の場合、sd_charge の値を形式電荷に変換して出力します。

-p --ph

: 酸性/塩基性官能基が解離状態になるように水素の原子情報、結合情報を付加します。-h オプションと同時に指定した場合には、-p オプションが優先され、-p オプションの水素付加形式で水素付加が行われます。

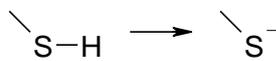
-m --metal

: コマンドラインで水素付加オプション(-h)、又は、解離状態水素付加オプション(-p)と同時に指定して金属配位型水素付加を行います。金属配位型水素付加は、カルボキシル基、リン酸基、スルホン酸基、ヒドロキサム酸、テトラゾール、キレート型構造のみとなります。それ以外の部位については、指定したオプション(-h、-p オプション)の水素付加方式に従います。

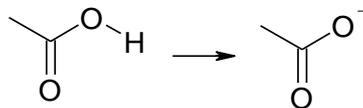
※-m --metal 指定時の水素付加形式について

以下に、-m --metal 指定時に対応する構造、及び、水素付加結果イメージを示します。

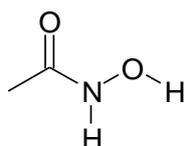
・チオール



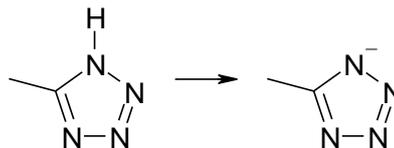
・カルボン酸



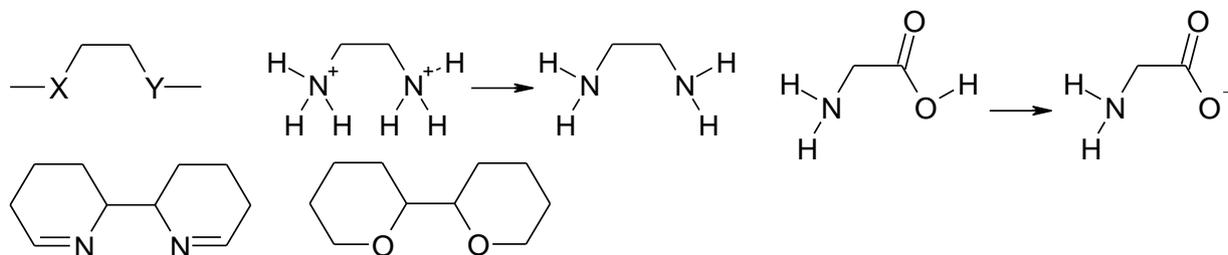
・ヒドロキサム酸



・テトラゾール



・キレート型(X, YはO又はN、Nは中性、Nの結合数3で平面構造を持つものは対象外)



-bo --bondorder

: 指定した原子番号の結合について、指定した結合次数を割り当てます。複数個所の結合の結合次数を割り当てる場合は複数回指定します。

※入力が PDB ファイル(-ipdb オプション指定時)の時のみ有効となります。

※入力が cif ファイル(-icif オプション指定時)は上記のオプションは無視されます。

-mop --mopac

: ハミルトニアンを指定して、MOPAC7 の計算を行います。指定方法は-mop キーワードの後に AM1、PM3 などのハミルトニアンを入力します。

出力ファイルに Sybyl mol2 または pdb ファイルを指定した場合には、MOPAC7 で計算した電荷を付与します。また、後述の-opt オプション指定時には構造最適化計算を行います。

※ 本機能は、Hgene コンパイル時に MOPAC7 を併せてコンパイルした場合のみ有効です。

-opt --optimization

: MOPAC7 の機能を利用して構造最適化計算を行います。

出力ファイルには最適化後の座標が出力されます。

※ 本機能は、Hgene コンパイル時に MOPAC7 を併せてコンパイルした場合のみ有効です。

-div -divide-molecule

: ファイル出力時に、1つの分子を複数の残基に分割して出力します。最大5残基まで分割します。

-max --maximum-length

: 分割する残基の最大結合長を指定します。デフォルト値は7となっています。

-div オプション指定時のみ有効です。

-min --minimum-length

: 分割する残基の最大結合長を指定します。デフォルト値は1となっています。

-div オプション指定時のみ有効です。

-ligname --ligand-name

: 分割する残基の残基名を指定します。最初2文字を指定し、3文字目はAからZの文字を自動的に割り当てます。

-3d --three-dimension

: 簡易的なエネルギー最小化計算を行い、出力ファイルにはその座標値を出力します。

-imdl、-imol2 指定時のみ有効です。

-wc --write-comment

: mol2 ファイルのコメント項目に、物性値等(分子式、分子量、分子電荷、水素ドナー数、水素アクセプタ数、HOMO エネルギー値、LUMO エネルギー値、キラル中心原子数、結合行列の最大固有値)を出力します。

※-omol2 指定時のみ有効です。HOMO エネルギー値、LUMO エネルギー値は-mop オプション指定時のみ出力されます。

-t --tautomer

: 芳香族複素環化合物の水素付加位置を決定します。芳香族複素環化合物で水素付加パターンに複数の候補が存在する場合、MOPAC AM1 でエネルギーを計算し、安定な構造を採用します。

本オプション使用時には、水素付加オプション-h、-p を併用する必要があります。

※本機能は、Hgene コンパイル時に MOPAC7 を併せてコンパイルした場合のみ有効です。

5. Hgene の計算例

入力例 1 : MDL mol → Sybyl mol2 変換

以下に示す MDL mol ファイル” sample01.mol” (図 1) を Sybyl mol2 ファイル” sample01.mol2” に変換する例を示します。

以下のコマンドを実行すると mol2 ファイル sample01.mol2 を作成する事ができます。sample01.mol2 では、Gasteiger 電荷を計算した結果を出力しています(デフォルト)。

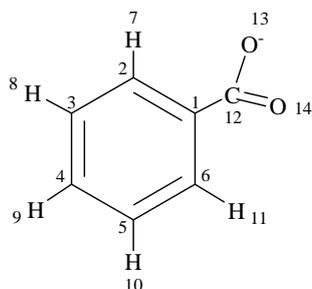


図 1. sample01 分子構造

【コマンド】

```
%Hgene -imdl sample01.mol -omol2 sample01.mol2
```

【入力 mol ファイル(sample01.mol)】

```
sample01.mol
14 14 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
 0.9495 0.8749 0.0000 C 0 0 0 0 0
-0.5286 1.7343 0.0000 C 0 0 0 0 0
-2.0119 0.8749 0.0000 C 0 0 0 0 0
-2.0119 -0.8348 0.0000 C 0 0 0 0 0
-0.5286 -1.6942 0.0000 C 0 0 0 0 0
 0.9495 -0.8348 0.0000 C 0 0 0 0 0
-0.5245 2.6882 0.0000 H 0 0 0 0 0
-2.9432 1.3837 0.0000 H 0 0 0 0 0
-2.8745 -1.4181 0.0000 H 0 0 0 0 0
-0.5245 -2.6882 0.0000 H 0 0 0 0 0
 1.9510 -1.4485 0.0000 H 0 0 0 0 0
 1.8507 1.3425 0.0000 C 0 0 0 0 0
 2.2557 2.5593 0.0000 O 0 5 0 0 0
 2.9432 1.0812 0.0000 O 0 0 0 0 0
 1 2 2 0 0 0
 6 1 1 0 0 0
 1 12 1 0 0 0
 2 3 1 0 0 0
 2 7 1 0 0 0
 3 4 2 0 0 0
 3 8 1 0 0 0
 4 5 1 0 0 0
 4 9 1 0 0 0
 5 6 2 0 0 0
 5 10 1 0 0 0
 6 11 1 0 0 0
12 13 1 0 0 0
12 14 2 0 0 0
M END
```

【出力 mol2 ファイル(sample01.mol2)】

```
@<TRIPOS>MOLECULE
sample01.mol2
14 14 0 0 0
SMALL
GASTEIGER

@<TRIPOS>ATOM
 1 C1      0.9495   0.8749   0.0000 C.ar   1 UNK    -0.0027
 2 C2     -0.5286   1.7343   0.0000 C.ar   1 UNK    -0.0529
 3 C3     -2.0119   0.8749   0.0000 C.ar   1 UNK    -0.0611
 4 C4     -2.0119  -0.8348   0.0000 C.ar   1 UNK    -0.0617
 5 C5     -0.5286  -1.6942   0.0000 C.ar   1 UNK    -0.0611
 6 C6      0.9495  -0.8348   0.0000 C.ar   1 UNK    -0.0529
 7 H1     -0.5245   2.6882   0.0000 H      1 UNK     0.0624
 8 H2     -2.9432   1.3837   0.0000 H      1 UNK     0.0618
 9 H3     -2.8745  -1.4181   0.0000 H      1 UNK     0.0618
10 H4     -0.5245  -2.6882   0.0000 H      1 UNK     0.0618
11 H5      1.9510  -1.4485   0.0000 H      1 UNK     0.0624
12 C7      1.8507   1.3425   0.0000 C.2    1 UNK     0.0717
13 O1      2.2557   2.5593   0.0000 O.co2  1 UNK    -0.5446
14 O2      2.9432   1.0812   0.0000 O.co2  1 UNK    -0.5446

@<TRIPOS>BOND
 1  1  2 ar
 2  1  6 ar
 3  1 12 1
 4  2  3 ar
 5  2  7 1
 6  3  4 ar
 7  3  8 1
 8  4  5 ar
 9  4  9 1
10  5  6 ar
11  5 10 1
12  6 11 1
13 12 13 1
14 12 14 2
```

入力例 2 : 入力ファイルの原子電荷を出力する場合(電荷入力値採用オプション(-dc))

Hgene では mol2 出力時に、デフォルトでは Gasteiger 電荷の計算結果を出力しますが、Gasteiger 電荷ではなく、入力ファイル中の電荷を出力したい場合には、オプション” -dc” を使用します。

オプション” -dc” を指定し、MDL mol ファイル” sample01.mol” (図 1)を Sybyl mol2 ファイル” sample02.mol2” に変換する場合には、以下のコマンドを実行します。

このコマンド実行により、入力ファイルの原子電荷情報を採用した mol2 ファイルを作成することができます。

【コマンド】

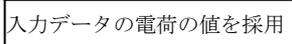
```
%Hgene -imdl sample01.mol -omol2 sample02.mol2 -dc
```

【出力 mol2 ファイル(sample02.mol2)】

```
@<TRIPOS>MOLECULE
sample02.mol2
14 14 0 0 0
SMALL
FORMAL_CHARGE

@<TRIPOS>ATOM
 1 C1      0.9495   0.8749   0.0000 C. ar   1 UNK      0.0000
 2 C2     -0.5286   1.7343   0.0000 C. ar   1 UNK      0.0000
 3 C3     -2.0119   0.8749   0.0000 C. ar   1 UNK      0.0000
 4 C4     -2.0119  -0.8348   0.0000 C. ar   1 UNK      0.0000
 5 C5     -0.5286  -1.6942   0.0000 C. ar   1 UNK      0.0000
 6 C6      0.9495  -0.8348   0.0000 C. ar   1 UNK      0.0000
 7 H1     -0.5245   2.6882   0.0000 H       1 UNK      0.0000
 8 H2     -2.9432   1.3837   0.0000 H       1 UNK      0.0000
 9 H3     -2.8745  -1.4181   0.0000 H       1 UNK      0.0000
10 H4     -0.5245  -2.6882   0.0000 H       1 UNK      0.0000
11 H5      1.9510  -1.4485   0.0000 H       1 UNK      0.0000
12 C7      1.8507   1.3425   0.0000 C. 2     1 UNK      0.0000
13 O1      2.2557   2.5593   0.0000 O. co2    1 UNK     -1.0000
14 O2      2.9432   1.0812   0.0000 O. co2    1 UNK      0.0000

@<TRIPOS>BOND
 1  1  2  ar
 2  1  6  ar
 3  1 12  1
 4  2  3  ar
 5  2  7  1
 6  3  4  ar
 7  3  8  1
 8  4  5  ar
 9  4  9  1
10  5  6  ar
11  5 10  1
12  6 11  1
13 12 13  1
14 12 14  2
```



入力例 3 : 水素付加を行う例(水素付加オプション(-h))

MDL mol ファイル” sample03.mol” (図 3)を、水素付加オプション(-h)を指定し、Sybyl mol2 ファイル” sample03.mol2” に変換する場合は以下のコマンドを実行します。

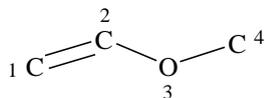


図 3. sample03 分子構造

【コマンド】

```
%Hgene -imdl sample03.mol -omol2 sample03.mol2 -h
```

【入力 mol ファイル(sample03.mol)】

```
sample03.mol
4 3 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
-2.1828 -0.1547 0.0000 C 0 0 0 0 0
-0.6703 0.2922 0.0000 C 0 0 0 0 0
0.7047 -0.2922 0.0000 O 0 0 0 0 0
2.1828 0.1891 0.0000 C 0 0 0 0 0
1 2 2 0 0 0
2 3 1 0 0 0
3 4 1 0 0 0
M END
```

【出力 mol2 ファイル(sample03.mol2)】

```
@<TRIPOS>MOLECULE
sample03.mol2
10 9 0 0 0
SMALL
GASTEIGER

@<TRIPOS>ATOM
1 C1 -2.1828 -0.1547 0.0000 C.2 1 UNK -0.0759
2 C2 -0.6703 0.2922 0.0000 C.2 1 UNK 0.0325
3 O1 0.7047 -0.2922 0.0000 O.3 1 UNK -0.3560
4 C3 2.1828 0.1891 0.0000 C.3 1 UNK 0.0422
5 H1 -2.9802 0.6030 0.0000 H 1 UNK 0.0554
6 H2 -2.4403 -1.2241 0.0000 H 1 UNK 0.0554
7 H3 -0.4128 1.3616 -0.0000 H 1 UNK 0.0879
8 H4 2.2016 1.3089 0.0000 H 1 UNK 0.0528
9 H5 2.6935 -0.2015 0.9171 H 1 UNK 0.0528
10 H6 2.6935 -0.2015 -0.9171 H 1 UNK 0.0528

@<TRIPOS>BOND
1 1 2 2
2 2 3 1
3 3 4 1
4 1 5 1
5 1 6 1
6 2 7 1
7 4 8 1
8 4 9 1
9 4 10 1
```

入力例 4 : 酸性/塩基性官能基解離オプション(-p)

MDL mol ファイル” sample04.mol (図 4)” を、解離状態水素付加オプション(-p)を指定し、Sybyl mol2 ファイル” sample04.mol2” に変換する場合は以下のコマンドを実行します。

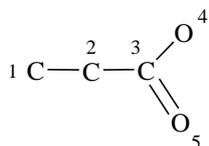


図 4. sample04 分子構造

【コマンド】

```
%Hgene -imdl sample04.mol -omol2 sample04.mol2 -p
```

※解離状態水素付加オプション(-p)と水素付加オプション(-h)を同時指定した場合には解離状態水素付加オプションが優先されます。つまり、以下のコマンドでも同様の結果が得られます。

```
%Hgene -imdl sample04.mol -omol2 sample04.mol2 -h -p
```

【入力 mol ファイル(sample04.mol)】

```
sample04.mol
5 4 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
-1.5820 0.1544 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.3965 0.1423 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.7775 0.1544 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.5820 0.9701 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.5023 -0.9701 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 2 1 0
2 3 1 0
3 4 1 0
3 5 2 0
M END
```

【出力 mol2 ファイル(sample04.mol2)】

```
@<TRIPOS>MOLECULE
sample04.mol2
10 9 0 0 0
SMALL
GASTEIGER

@<TRIPOS>ATOM
 1 C1   -1.5820  0.1544  0.0000 C.3   1 UNK   -0.0602
 2 C2   -0.3965  0.1423  0.0000 C.3   1 UNK   -0.0160
 3 C3    0.7775  0.1544  0.0000 C.2   1 UNK    0.0415
 4 O1    1.5820  0.9701  0.0000 O.co2  1 UNK   -0.5498
 5 O2    1.5023 -0.9701  0.0000 O.co2  1 UNK   -0.5498
 6 H1   -1.9358  1.2170  0.0000 H       1 UNK    0.0233
 7 H2   -1.9520 -0.3713 -0.9171 H       1 UNK    0.0233
 8 H3   -1.9520 -0.3713  0.9171 H       1 UNK    0.0233
 9 H4   -0.0265  0.6680 -0.9171 H       1 UNK    0.0322
10 H5   -0.0265  0.6680  0.9171 H       1 UNK    0.0322

@<TRIPOS>BOND
 1  1  2  1
 2  2  3  1
 3  3  4  1
 4  3  5  2
 5  1  6  1
 6  1  7  1
 7  1  8  1
 8  2  9  1
 9  2 10  1
```

※解離オプション(-p)を用いないで水素付加をした場合

入力ファイルでは、酸性官能基のO原子の電荷が指定されていないため、
O原子に水素付加されます。

入力例 5 : Sybyl mol2 -> MDL mol 変換

以下に示す Sybyl mol2 ファイル” sample05.mol2” (図 5) を MDL mol ファイル” sample05.mol” に変換する例を示します。

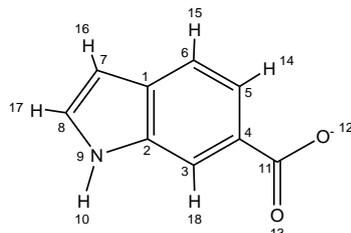


図 5. sample05 分子構造

【コマンド】

```
%Hgene -imol2 sample05.mol2 -omdl sample05.mol
```

【入力 mol2 ファイル(sample05.mol2)】

```
@<TRIPOS>MOLECULE
sample05.mol2
18 19 0 0 0
SMALL
GASTEIGER
@<TRIPOS>ATOM
 1 C1      -0.5328   0.6359   0.0000 C.ar   1 <1>      0.0011
 2 C2      -0.5328  -0.5328   0.0000 C.ar   1 <1>      0.0472
 3 C3       0.4794  -1.1172   0.0000 C.ar   1 <1>     -0.0276
 4 C4       1.4915  -0.5328   0.0000 C.ar   1 <1>      0.0176
 5 C5       1.4915   0.6359   0.0000 C.ar   1 <1>      0.0505
 6 C6       0.4794   1.2203   0.0000 C.ar   1 <1>     -0.0336
 7 C7      -1.6444   0.9971   0.0000 C.ar   1 <1>     -0.0366
 8 C8      -2.3313   0.0516   0.0000 C.ar   1 <1>      0.0027
 9 N1      -1.6444  -0.8940   0.0000 N.ar   1 <1>     -0.3606
10 H1      -1.9422  -1.9078   0.0000 H      1 <1>      0.1653
11 C9       2.3203  -1.0484   0.0000 C.2    1 <1>      0.0731
12 O1       2.9734  -0.3266   0.0000 O.co2   1 <1>     -0.5446
13 O2       2.8359  -1.8734   0.0000 O.co2   1 <1>     -0.5446
14 H2       2.1484   1.0484   0.0000 H      1 <1>     -0.0829
15 H3       0.4984   1.9078   0.0000 H      1 <1>      0.0639
16 H4      -1.8391   1.5641   0.0000 H      1 <1>      0.0638
17 H5      -2.9734   0.1203   0.0000 H      1 <1>      0.0807
18 H6       0.4984  -1.9078   0.0000 H      1 <1>      0.0645
@<TRIPOS>BOND
 1  1  2  ar
 2  2  3  ar
 3  3  4  ar
 4  4  5  ar
 5  5  6  ar
 6  6  1  ar
 7  1  7  ar
 8  7  8  ar
 9  8  9  ar
10  9  2  ar
11  9 10  1
12  4 11  1
13 11 12  ar
14 11 13  ar
15  5 14  1
16  6 15  1
17  7 16  1
18  8 17  1
19  3 18  1
```

【出力 mol ファイル(sample05.mol)】

```
sample05.mol
Hgene
18 19 0 0 0 0
-0.5328 0.6359 0.0000 C 0 0 0 0 0
-0.5328 -0.5328 0.0000 C 0 0 0 0 0
0.4794 -1.1172 0.0000 C 0 0 0 0 0
1.4915 -0.5328 0.0000 C 0 0 0 0 0
1.4915 0.6359 0.0000 C 0 0 0 0 0
0.4794 1.2203 0.0000 C 0 0 0 0 0
-1.6444 0.9971 0.0000 C 0 0 0 0 0
-2.3313 0.0516 0.0000 C 0 0 0 0 0
-1.6444 -0.8940 0.0000 N 0 0 0 0 0
-1.9422 -1.9078 0.0000 H 0 0 0 0 0
2.3203 -1.0484 0.0000 C 0 0 0 0 0
2.9734 -0.3266 0.0000 O 0 5 0 0 0
2.8359 -1.8734 0.0000 O 0 0 0 0 0
2.1484 1.0484 0.0000 H 0 0 0 0 0
0.4984 1.9078 0.0000 H 0 0 0 0 0
-1.8391 1.5641 0.0000 H 0 0 0 0 0
-2.9734 0.1203 0.0000 H 0 0 0 0 0
0.4984 -1.9078 0.0000 H 0 0 0 0 0
1 2 2
2 3 1
3 4 2
4 5 1
5 6 2
1 6 1
1 7 1
7 8 2
8 9 1
2 9 1
9 10 1
4 11 1
11 12 1
11 13 2
5 14 1
6 15 1
7 16 1
8 17 1
3 18 1
M END
```

入力例 6 : mopac 出力

6-1. 入力分子の原子数が 3 より大きい場合 (XYZ 出力)

PDB ファイル” sample06.pdb” を分子電荷指定オプション (例では分子電荷=0) を指定し、mopac dat ファイル” sample06.dat” に変換する場合は以下のコマンドを実行します。

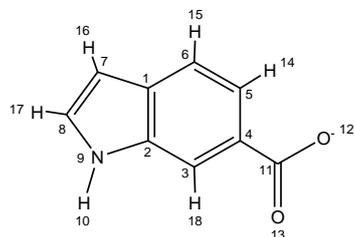


図 6. sample06 分子構造

【コマンド】

```
%Hgene -ipdb sample06.pdb -omopcrt sample06.dat -ch 0
```

【入力 PDB ファイル (sample06.pdb)】

ATOM	1	C	LIG	1	-0.533	0.636	0.000
ATOM	2	C	LIG	1	-0.533	-0.533	0.000
ATOM	3	C	LIG	1	0.479	-1.117	0.000
ATOM	4	C	LIG	1	1.492	-0.533	0.000
ATOM	5	C	LIG	1	1.492	0.636	0.000
ATOM	6	C	LIG	1	0.479	1.220	0.000
ATOM	7	C	LIG	1	-1.644	0.997	0.000
ATOM	8	C	LIG	1	-2.331	0.052	0.000
ATOM	9	N	LIG	1	-1.644	-0.894	0.000
ATOM	10	H	LIG	1	-1.942	-1.908	0.000
ATOM	11	C	LIG	1	2.320	-1.048	0.000
ATOM	12	O	LIG	1	2.973	-0.327	0.000
ATOM	13	O	LIG	1	2.836	-1.873	0.000
ATOM	14	H	LIG	1	2.148	1.048	0.000
ATOM	15	H	LIG	1	0.498	1.908	0.000
ATOM	16	H	LIG	1	-1.839	1.564	0.000
ATOM	17	H	LIG	1	-2.973	0.120	0.000
ATOM	18	H	LIG	1	0.498	-1.908	0.000

【出力 MOPAC ファイル(sample06. dat)】

```
AM1 XYZ GNORM=1000 VECTORS MMOK T=1800 CHARGE=0
```

```
C -0.5330 1 0.6360 1 0.0000 1
C -0.5330 1 -0.5330 1 0.0000 1
C 0.4790 1 -1.1170 1 0.0000 1
C 1.4920 1 -0.5330 1 0.0000 1
C 1.4920 1 0.6360 1 0.0000 1
C 0.4790 1 1.2200 1 0.0000 1
C -1.6440 1 0.9970 1 0.0000 1
C -2.3310 1 0.0520 1 0.0000 1
N -1.6440 1 -0.8940 1 0.0000 1
H -1.9420 1 -1.9080 1 0.0000 1
C 2.3200 1 -1.0480 1 0.0000 1
O 2.9730 1 -0.3270 1 0.0000 1
O 2.8360 1 -1.8730 1 0.0000 1
H 2.1480 1 1.0480 1 0.0000 1
H 0.4980 1 1.9080 1 0.0000 1
H -1.8390 1 1.5640 1 0.0000 1
H -2.9730 1 0.1200 1 0.0000 1
H 0.4980 1 -1.9080 1 0.0000 1
```

6-2. 入力分子の原子数が 3 以下の場合(Z-matrix 出力)

mol ファイル” sample06_2.mol” を分子電荷指定オプション(例では分子電荷=0)を指定し、mopac dat ファイル” sample06_2.dat” に変換する場合は以下のコマンドを実行します。

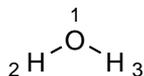


図 6. sample06_2 分子構造

【コマンド】

```
%Hgene -imdl sample06_2.mol -omopert sample06_2.dat -ch 0
```

【入力 mol ファイル(sample06_2.mol)】

```
sample06_2.mol
3 2 0 0 0          1 V2000
-0.3177  0.3306  0.0000 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.6589 -0.5475  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
 0.6180  0.2210  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 2 1 0
1 3 1 0
M END
~
```

【出力 PDB ファイル(sample06_2. dat)】

```
AM1 XYZ GNORM=1000 VECTORS MMOK T=1800 CHARGE=0  
  
O 0.0000 1 0.0000 1 0.0000 1 0 0 0  
H 0.9421 1 0.0000 1 0.0000 1 1 0 0  
H 0.9421 1 104.5537 1 0.0000 1 1 2 0  
~
```

※但し、入力ファイルが PDB の場合、結合情報の記述が任意のため、原子数が 3 以下の場合も Z-matrix 出力をせずに XYZ 出力をします。

入力例7：水素削除オプション(“-d”)

MDL mol ファイル” sample07.mol” を水素削除オプションを指定し、
ファイル” sample07_out.mol” に変換する場合は以下のコマンドを実行します。

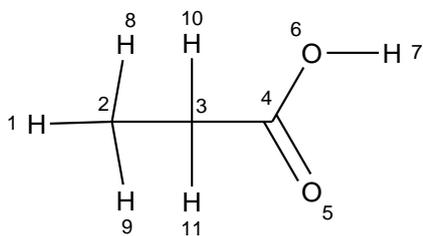


図 7. sample07 分子構造

【コマンド】

```
%Hgene -imdl sample07.mol -omdl sample07_out.mol -d
```

【入力 mol ファイル(sample07.mol)】

```
sample07.mol
ChemDraw09060715422D

11 10 0 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
-3.2238 -0.0336 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.8611 -0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.4082 -0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.0446 -0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.7710 -1.2582 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.7710 1.2582 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.2238 1.2582 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.6088 1.4308 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.6088 -1.4308 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.4082 1.4528 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.4082 -1.4528 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

1 2 1 0
2 3 1 0
3 4 1 0
4 5 2 0
4 6 1 0
6 7 1 0
2 8 1 0
2 9 1 0
3 10 1 0
3 11 1 0
M END
```

【出力 mol ファイル(sample07_out.mol)】

```
sample07_out.mol
  Hgene

5 4 0 0 0 0
-1.8611 -0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0
-0.4082 -0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0
 1.0446 -0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0
 1.7710 -1.2582 0.0000 O 0 0 0 0 0
 1.7710  1.2582 0.0000 O 0 0 0 0 0
1 2 1
2 3 1
3 4 2
3 5 1
M END
```

入力例 8 : PDB -> MDL mol 変換

MDL mol ファイル” sample08.pdb” を解離状態水素付加オプションを指定し、ファイル” sample08_out.mol” に変換する場合は以下のコマンドを実行します。

【コマンド】

```
%Hgene -p -ipdb sample08.pdb -omdl sample08_out.mol
```

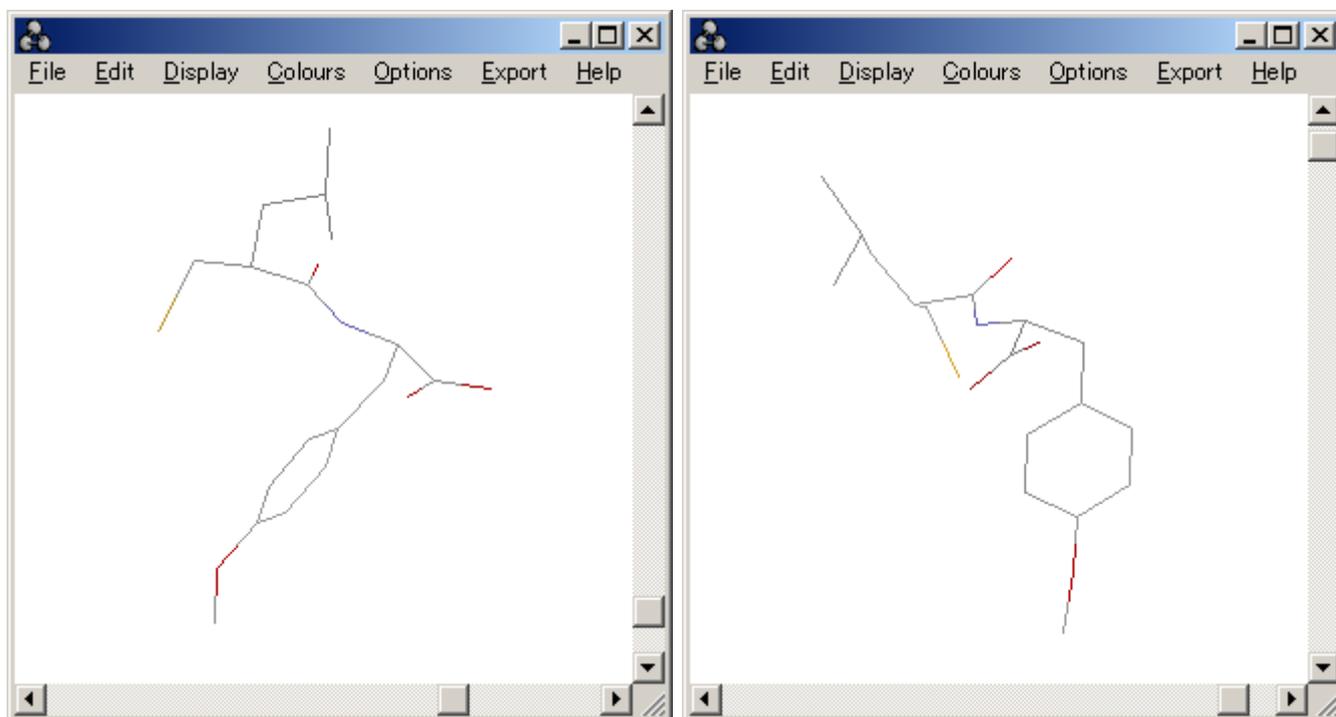


図 8-1. sample08 入力分子構造

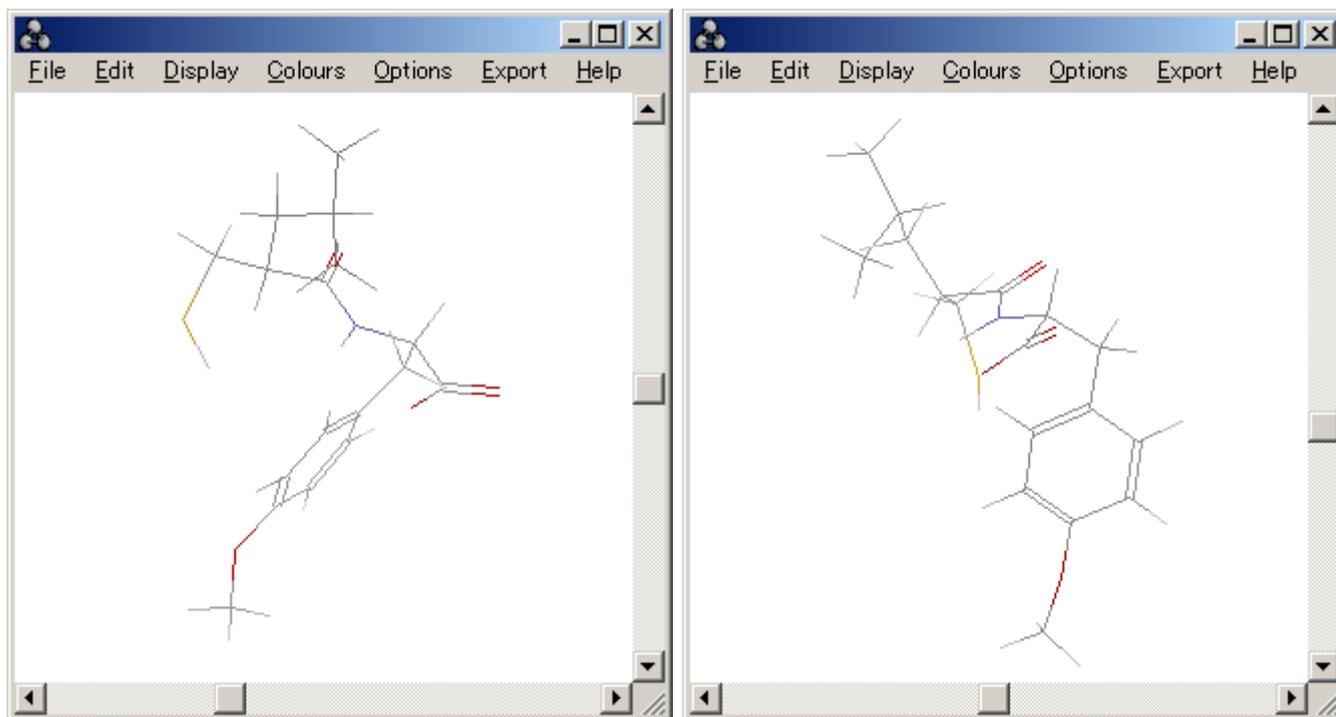


図 8-2. sample08 出力分子構造

【入力 mol ファイル(sample08.pdb)】

ATOM	1	C1	SLE	D	311	-2.897	23.689	47.603	0.85	38.92	1ATL3411
ATOM	2	O1	SLE	D	311	-2.120	24.384	48.273	0.85	24.46	1ATL3412
ATOM	3	C2	SLE	D	311	-2.954	22.157	47.744	0.85	24.31	1ATL3413
ATOM	4	CH	SLE	D	311	-1.561	21.541	47.897	0.85	25.95	1ATL3414
ATOM	5	S	SLE	D	311	-0.594	21.425	46.361	0.85	47.45	1ATL3415
ATOM	6	C3	SLE	D	311	-3.788	21.784	48.978	0.85	34.72	1ATL3416
ATOM	7	C4	SLE	D	311	-5.115	22.533	49.211	0.85	43.48	1ATL3417
ATOM	8	CM	SLE	D	311	-5.687	22.163	50.584	0.85	48.73	1ATL3418
ATOM	9	C5	SLE	D	311	-6.126	22.229	48.099	0.85	35.94	1ATL3419
ATOM	10	N	TYR	D	312	-3.781	24.202	46.759	0.85	40.07	1ATL3420
ATOM	11	CA	TYR	D	312	-3.903	25.628	46.508	0.85	16.99	1ATL3421
ATOM	12	C	TYR	D	312	-5.129	25.899	45.622	0.85	8.16	1ATL3422
ATOM	13	O	TYR	D	312	-5.656	27.022	45.604	0.85	25.67	1ATL3423
ATOM	14	CB	TYR	D	312	-2.598	26.175	45.903	0.85	36.07	1ATL3424
ATOM	15	CG	TYR	D	312	-2.056	25.446	44.690	0.85	17.85	1ATL3425
ATOM	16	CD1	TYR	D	312	-2.683	24.312	44.191	0.85	28.42	1ATL3426
ATOM	17	CD2	TYR	D	312	-0.926	25.920	44.022	0.85	10.82	1ATL3427
ATOM	18	CE1	TYR	D	312	-2.212	23.672	43.065	0.85	41.77	1ATL3428
ATOM	19	CE2	TYR	D	312	-0.447	25.292	42.896	0.85	19.61	1ATL3429
ATOM	20	CZ	TYR	D	312	-1.094	24.160	42.418	0.85	43.84	1ATL3430
ATOM	21	OH	TYR	D	312	-0.640	23.497	41.291	0.85	44.74	1ATL3431
ATOM	22	OXT	TYR	D	312	-5.614	24.933	45.003	0.85	34.64	1ATL3432
ATOM	23	C	CH3	D	312	-1.170	23.288	39.981	0.85	11.08	1ATL3434

【出力 mol ファイル(sample08_out.mol)】

```
sample08_out.mol
  Hgene

47 47 0 0 0 0
-2.8970 23.6890 47.6030 C 0 0 0 0 0
-2.1200 24.3840 48.2730 O 0 0 0 0 0
-2.9540 22.1570 47.7440 C 0 0 0 0 0
-1.5610 21.5410 47.8970 C 0 0 0 0 0
-0.5940 21.4250 46.3610 S 0 0 0 0 0
-3.7880 21.7840 48.9780 C 0 0 0 0 0
-5.1150 22.5330 49.2110 C 0 0 0 0 0
-5.6870 22.1630 50.5840 C 0 0 0 0 0
-6.1260 22.2290 48.0990 C 0 0 0 0 0
-3.7810 24.2020 46.7590 N 0 0 0 0 0
-3.9030 25.6280 46.5080 C 0 0 0 0 0
-5.1290 25.8990 45.6220 C 0 0 0 0 0
-5.6560 27.0220 45.6040 O 0 0 0 0 0
-2.5980 26.1750 45.9030 C 0 0 0 0 0
-2.0560 25.4460 44.6900 C 0 0 0 0 0
-2.6830 24.3120 44.1910 C 0 0 0 0 0
-0.9260 25.9200 44.0220 C 0 0 0 0 0
-2.2120 23.6720 43.0650 C 0 0 0 0 0
-0.4470 25.2920 42.8960 C 0 0 0 0 0
-1.0940 24.1600 42.4180 C 0 0 0 0 0
-0.6400 23.4970 41.2910 O 0 0 0 0 0
-5.6140 24.9330 45.0030 O 0 5 0 0 0
-1.1700 23.2880 39.9810 C 0 0 0 0 0
-3.4057 21.7220 46.8161 H 0 0 0 0 0
-0.9631 22.1640 48.6103 H 0 0 0 0 0
-1.6647 20.4990 48.2944 H 0 0 0 0 0
-1.3073 21.8844 45.3761 H 0 0 0 0 0
-4.0671 20.7011 48.9157 H 0 0 0 0 0
-3.1787 21.9690 49.8994 H 0 0 0 0 0
-4.9061 23.6309 49.2840 H 0 0 0 0 0
-5.7203 23.0811 51.2246 H 0 0 0 0 0
-6.7207 21.7532 50.4500 H 0 0 0 0 0
-5.0283 21.3907 51.0573 H 0 0 0 0 0
-6.4277 23.1893 47.6080 H 0 0 0 0 0
-5.6483 21.5495 47.3477 H 0 0 0 0 0
-7.0232 21.7313 48.5480 H 0 0 0 0 0
-4.4164 23.5875 46.2500 H 0 0 0 0 0
-4.1705 26.1451 47.4648 H 0 0 0 0 0
-2.7617 27.2351 45.5809 H 0 0 0 0 0
-1.7906 26.1317 46.6780 H 0 0 0 0 0
-3.5730 23.9084 44.6960 H 0 0 0 0 0
-0.4007 26.8119 44.3943 H 0 0 0 0 0
-2.7263 22.7767 42.6856 H 0 0 0 0 0
  0.4416 25.6870 42.3819 H 0 0 0 0 0
-2.1683 23.7904 39.9071 H 0 0 0 0 0
-0.4654 23.7258 39.2285 H 0 0 0 0 0
-1.2822 22.1877 39.8043 H 0 0 0 0 0
```

```
  1  2  2
  1  3  1
  1 10  1
  3  4  1
  3  6  1
  4  5  1
  6  7  1
  7  8  1
  7  9  1
 10 11  1
 11 12  1
 11 14  1
 12 13  2
 12 22  1
 14 15  1
 15 16  2
 15 17  1
 16 18  1
 17 19  2
 18 20  2
 19 20  1
 20 21  1
 21 23  1
  3 24  1
  4 25  1
  4 26  1
  5 27  1
  6 28  1
  6 29  1
  7 30  1
  8 31  1
  8 32  1
  8 33  1
  9 34  1
  9 35  1
  9 36  1
 10 37  1
 11 38  1
 14 39  1
 14 40  1
 16 41  1
 17 42  1
 18 43  1
 19 44  1
 23 45  1
 23 46  1
 23 47  1
M END
```

入力例 9 : PDB -> MDL mol 変換(結合次数をユーザが指定する場合)

含窒素複素環等では複数の水素の付加させ方が存在する場合があります。この様な場合、特定の結合の結合次数を指定する事により、指定した結合次数を満たす様に水素付加を行います。結合次数を指定する場合には-bo(--bondorder)オプションを使用します。コマンドの2つ目の例は原子7番と9番の結合に二重結合を割り当てる様に指定しています。

【コマンド】

```
%Hgene -p -ipdb sample09.pdb -omdl sample09_out1.mol
```

```
%Hgene -p -ipdb sample09.pdb -omdl sample09_out2.mol -bo 7 9 2
```

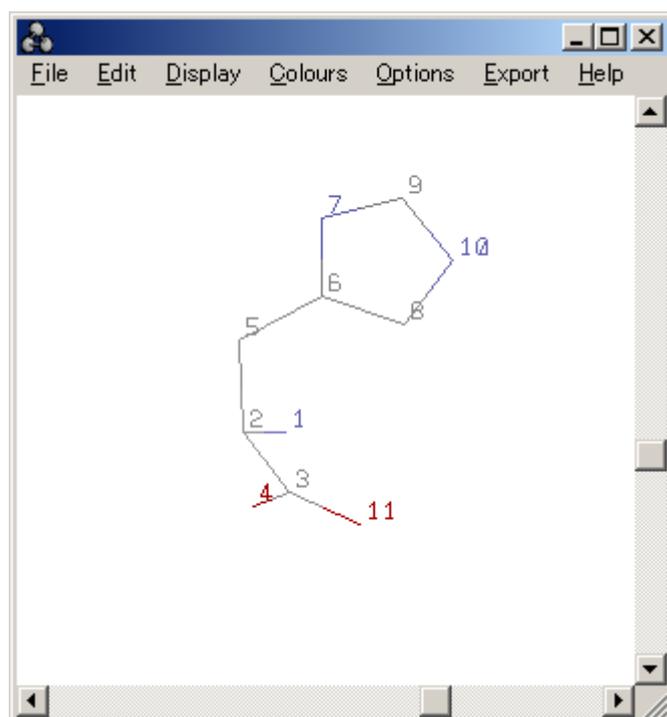
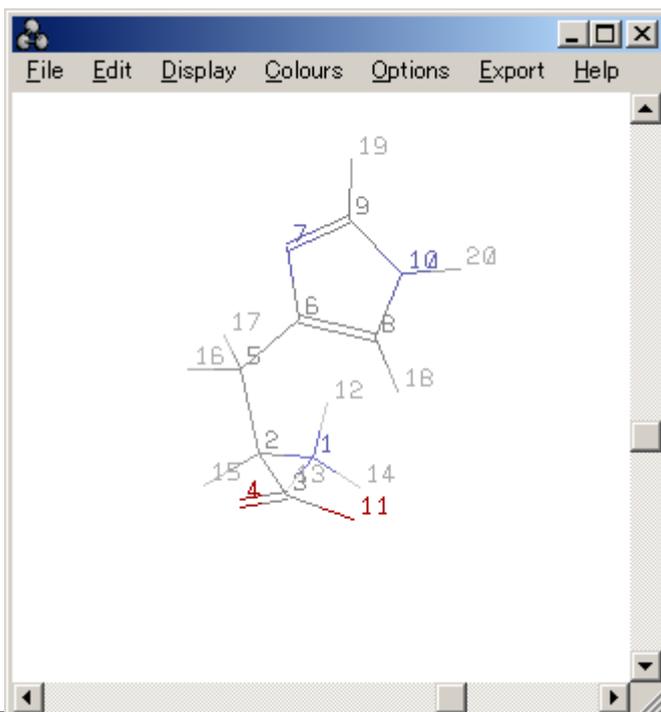
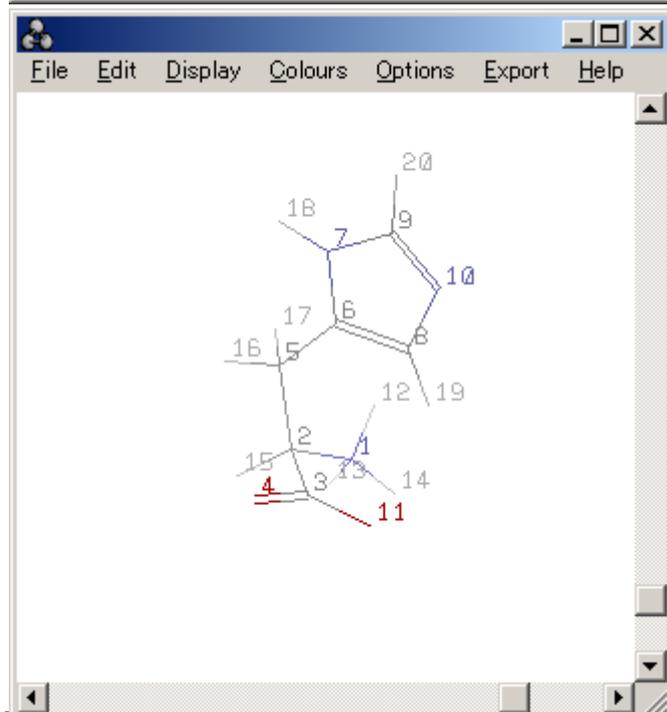


図 9. sample09 入力分子構造(上段)

sample09 出力分子構造(下段左: -bo オプションなし、下段右: -bo オプションあり)



入力例 10 : 金属配位型の水素付加(-m オプション指定時)

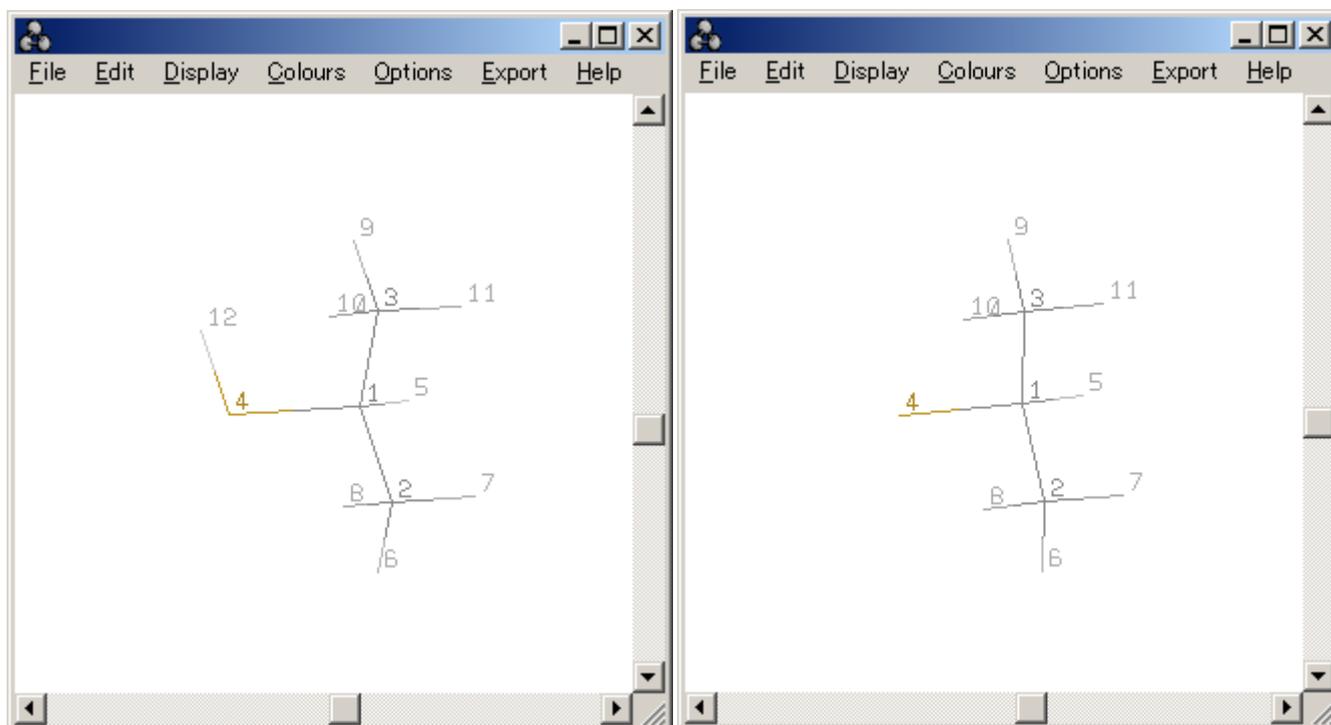
Hgene には、金属配位型の水素付加オプションが存在します。分子内にチオール構造、カルボン酸、ヒドロキサム酸、テトラゾール、キレート型(-X-A-B-Y-, A、Bは任意、X、YはO又はN)の構造を持つ分子に対して、-m オプションを指定した場合、金属配位型の水素付加を行います。

【コマンド】

```
%Hgene -imol2 sample10.mol2 -omol2 sample10_out1.mol2 -p
```

```
%Hgene -imol2 sample10.mol2 -omol2 sample10_out2.mol2 -p -m
```

図 10. sample10 出力構造(左 : -p オプション指定時、右 : -p -m オプション指定時)



入力例 1 1 : 分子を残基に分割する機能(-div オプション指定時)

Hgene には、分子を残基に分割する機能があります。分割した座標ファイルを作成したい場合には-div オプションを使用します。

【コマンド】

```
%Hgene -ipdb sample08.pdb -omol2 sample08_out2.mol2 -p -div
```

【出力 mol ファイル(sample08_out2.mol)原子部のみ】

```
@<TRIPOS>MOLECULE
sample8_out2.mol2
 47 47 0 0 0
SMALL
GASTEIGER

@<TRIPOS>ATOM
 1 C1      -2.8970   23.6890   47.6030 C.2   1   LGA      0.2174
 2 O1      -2.1200   24.3840   48.2730 O.2   1   LGA     -0.2755
 3 C2      -2.9540   22.1570   47.7440 C.3   1   LGA      0.0445
 4 CH      -1.5610   21.5410   47.8970 C.3   1   LGA      0.0018
 5 S        -0.5940   21.4250   46.3610 S.3   1   LGA     -0.1775
 6 C3      -3.7880   21.7840   48.9780 C.3   1   LGA     -0.0388
 7 C4      -5.1150   22.5330   49.2110 C.3   1   LGA     -0.0460
 8 CM      -5.6870   22.1630   50.5840 C.3   1   LGA     -0.0626
 9 C5      -6.1260   22.2290   48.0990 C.3   1   LGA     -0.0626
10 N       -3.7810   24.2020   46.7590 N.am  1   LGA     -0.3068
(略)
22 H12     -5.6483   21.5495   47.3477 H     1   LGA      0.0232
23 H13     -7.0232   21.7313   48.5480 H     1   LGA      0.0232
24 H14     -4.4164   23.5875   46.2500 H     1   LGA      0.1493
25 CA      -3.9030   25.6280   46.5080 C.3   2   LGB      0.0665
26 C       -5.1290   25.8990   45.6220 C.2   2   LGB      0.0623
27 O       -5.6560   27.0220   45.6040 O.co2  2   LGB     -0.5479
28 CB      -2.5980   26.1750   45.9030 C.3   2   LGB     -0.0039
29 CG      -2.0560   25.4460   44.6900 C.ar  2   LGB     -0.0451
30 CD1     -2.6830   24.3120   44.1910 C.ar  2   LGB     -0.0561
31 CD2     -0.9260   25.9200   44.0220 C.ar  2   LGB     -0.0561
32 CE1     -2.2120   23.6720   43.0650 C.ar  2   LGB     -0.0314
33 CE2     -0.4470   25.2920   42.8960 C.ar  2   LGB     -0.0314
34 CZ      -1.0940   24.1600   42.4180 C.ar  2   LGB      0.0758
35 OXT     -5.6140   24.9330   45.0030 O.co2  2   LGB     -0.5479
(略)
43 OH      -0.6400   23.4970   41.2910 O.3   3   LGC     -0.3479
44 C       -1.1700   23.2880   39.9810 C.3   3   LGC      0.0430
45 H22     -2.1683   23.7904   39.9071 H     3   LGC      0.0529
46 H23     -0.4654   23.7258   39.2285 H     3   LGC      0.0529
47 H24     -1.2822   22.1877   39.8043 H     3   LGC      0.0529

@<TRIPOS>BOND
 1  1  2  2
 2  1  3  1
 3  1 10  1
 4  3  4  1
 5  3  6  1
 6  4  5  1
 7  6  7  1
 8  7  8  1
(略)
```

入力例 1 2 : MOPAC 連携による構造最適化(-mop、-opt オプション指定時)

Hgene では、MOPAC7 の機能を利用して構造最適化を行う事ができます。MOPAC7 を使用する際には-mop オプションを、最適化を行う場合には、-opt オプションを指定します。

【コマンド】

```
%Hgene -imdl sample01.mol -omol2 sample01_out.mol2 -p -mop AM1 -opt
```

入力例 1 3 : 分子力学法によるエネルギー最小化(-3d オプション指定時)

Hgene では、-3d オプションを指定して、簡易的なエネルギー最小化を行う事ができます。

【コマンド】

```
%Hgene -imdl sample01.mol -omol2 sample01_out.mol2 -p -3d
```

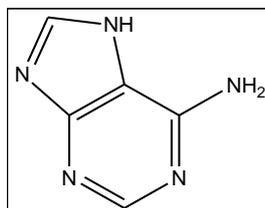
入力例 1 4 : Tautomer の生成 (-t オプション指定時)

Hgene では、-t、--tautomer オプションを指定して、複素芳香環化合物の水素付加の最適化を行う事ができます。また、グアニジウム骨格の水素付加を行う事ができます。

【コマンド】

```
%Hgene -imdl sample10.mol -omol2 sample10_out.mol2 -p -t -3d
```

入力構造



出力構造

