

# *myPresto 5.0*

*- membene -*

USER MANUAL

2018/1/23

## 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、新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)、及び、経済産業省 (METI) 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・京極好正博士の推進する研究プロジェクトで開発されました。

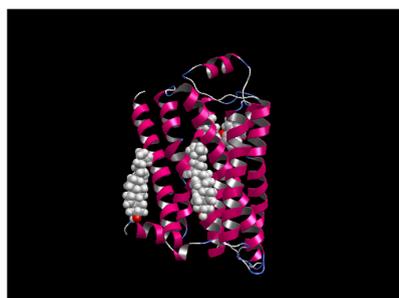
---

## 目次

1. membgene について .....	1
2. membgene のインストール方法 .....	2
3. テストプログラムの実行方法 .....	2
4. membgene の実行方法 .....	2

# 1. membgene について

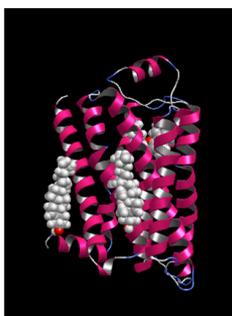
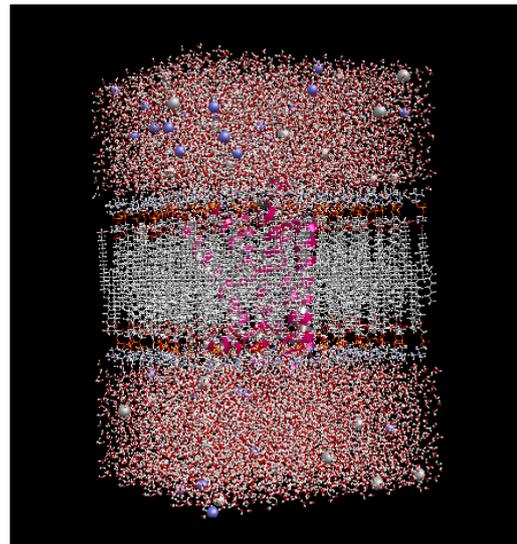
membgene は、膜貫通タンパク質の周辺に、適切に脂質二重膜を配置し、その後に水分子とイオンを追加します。



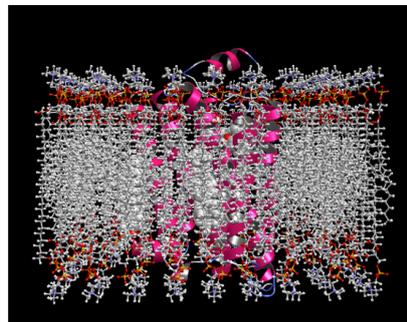
membgene



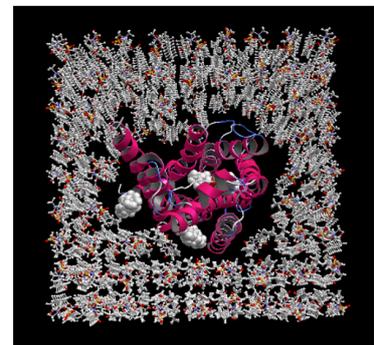
脂質二重膜、  
水、イオンの  
付加



membgene使用前



membgene使用后  
(水とイオンを非表示中)



## 2. membgene のインストール方法

membgene は、membgene\_pack に含まれています。membgene\_pack は、以下の手順でインストールします。

```
% tar -czvf membgene_packYYMMDD.tar.gz      (YYMMDD は日付を示す 6 桁の数字です)
% cd membgene_packYYMMDD
% bin/install.sh      (GNU コンパイラを使う場合)
% bin/install.sh intel (Intel コンパイラを使う場合)
```

## 3. テストプログラムの実行方法

membgene は、membgene\_pack に含まれています。membgene\_pack は、以下の手順でインストールします。テストプログラムの実行は、membgene\_packYYMMDD/の下で行います。

```
% bin/test_membgene.sh
```

テストプログラムは、sample/の下に用意されているインプットファイルを使用します。test\_membgene/の下に、protein\_mem\_wat\_ion.pdb と protein\_mem\_wat\_ion.tpl が作成されます。

## 4. membgene の実行方法

membgene を実行する前には、膜タンパク質と膜タンパク質の内部、もしくは表面に結合する分子の立体構造を用意する必要があります。

membgene は、membgene\_packYYMMDD/の下に、作業用ディレクトリを用意して、そこに必要なファイルとディレクトリを配置してから実行します。以下のコマンドは、membgene\_packYYMMDD/で実行します。

```
% mkdir work/      (ディレクトリ名は任意です)
% cp -R data/* work/
protein.pdb と protein.tpl を work/の下に置きます。
% cd work
% ../bin/membgene.sh
```