

# *myPresto 5.0*

*- tplgeneX -*

USER MANUAL  
2018/1/12

### 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. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の入出力ファイルについて .....	2
2-1 入力ファイル .....	2
2-1-1 PDB 形式ファイル .....	3
2-1-2 PDBx/mmCIF 形式ファイル .....	5
2-1-3 DIHED 形式ファイル .....	9
2-2 カ場データベースファイル .....	11
2-2-1. データベースファイル一覧 .....	11
2-2-2. 対応残基情報 .....	11
2-3 出力ファイル .....	14
3. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX のディレクトリ構成 .....	15
3-1 tplgeneX/src ディレクトリ .....	15
3-2 tplgeneX/DB ディレクトリ .....	15
3-3 sample/tplgeneX_sample ディレクトリ .....	15
3-4 LibMyPresto ディレクトリ .....	15
4. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX のインストール .....	16
5. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の使用法 .....	17
5-1 環境設定 .....	17
5-2 入力ファイルの準備 .....	18
5-3 計算の実行 .....	18
5-3-1 対話形式で実行する場合 .....	18
5-3-2 オプションを用いて実行する場合 .....	21
6. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の計算例 .....	22
6-1 ACE-ALA-ALA-NME 分子の計算方法(オプションを指定して計算を行う場合) .....	22
6-2 ACE-ALA-ALA-NME 分子の計算方法(対話形式で計算を行う場合) .....	23
6-3 DIHED 形式ファイルを用いての計算方法 .....	26
6-4 タンパク質、リガンド、金属、水分子を含む複合体の計算方法 .....	28
6-5 PDBx/mmCIF ファイルを入力とする場合の計算方法 .....	30

## 1. はじめに

分子シミュレーションシステム myPresto/cosgene を用いてコンフォメーションエネルギー計算を行う場合は、まず始めにその分子系のトポロジー情報を記述したトポロジーファイルを作成する必要があります。トポロジーファイルはトポロジージェネレータを使用する事により簡単に作成することができます。

トポロジージェネレータは、タンパク質や核酸などの生体高分子に対応した、高分子トポロジージェネレータ `tplgeneX`、及び、リガンド等の低分子に対応した、低分子トポロジージェネレータ `tplgeneL` の2つのサブシステムから構成しています。

本マニュアルでは2つのサブシステムのうち、高分子トポロジージェネレータ `tplgeneX` について説明します。

本マニュアルは、6章からなっています。以下に各章の概要を示します。

2章では `tplgeneX` の入出力情報について説明します。

3章では `tplgeneX` のディレクトリ構成について説明します。

4章では `tplgeneX` のインストール方法について説明します。

5章では `tplgeneX` の使用方法について説明します。

6章では `tplgeneX` の計算例について説明します。

## 2. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の入出力ファイルについて

高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の入力情報、力場データベース情報、出力情報について説明します。

### 2-1 入力ファイル

tplgeneX で計算を行う場合、入力ファイルとして PDB 形式ファイル、PDBx/mmCIF 形式ファイル、又は、DIHED 形式ファイルのいずれかを使用します。

#### ①PDB 形式ファイルからの入力の場合(タンパク質、核酸)

PDB ファイルを入力にする場合は以下の情報を参照して計算を行います。

下記情報のうち、a、b は必須入力です。c、d、e は必要な場合にのみ指定することができます。

- a) アミノ酸、核酸残基名、及び、残基並び情報
- b) アミノ酸、核酸残基のカーテシアン座標情報
- c) ジスルフィド結合情報
- d) 環状分子情報
- e) 低分子、水、金属の座標情報\*

※低分子のトポロジーファイル(tplgeneL で作成)を予め準備する必要があります。

#### ②PDBx/mmCIF 形式ファイルからの入力の場合(タンパク質、核酸)

PDB ファイルを入力にする場合は以下の情報を参照して計算を行います。

下記情報のうち、a、b は必須入力です。c、d、e は必要な場合にのみ指定することができます。

- a) アミノ酸、核酸残基名、及び、残基並び情報
- b) アミノ酸、核酸残基のカーテシアン座標情報
- c) ジスルフィド結合情報
- d) 環状分子情報
- e) 低分子、水、金属の座標情報\*

※低分子のトポロジーファイル(tplgeneL で作成)を予め準備する必要があります。

#### ③DIHED ファイル形式からの入力の場合

DIHED 形式のファイルを入力にする場合は以下の情報を参照して計算を行います。

下記情報のうち、a は必須入力です。b、c、d は必要な場合に指定することができます。

- a) アミノ酸残基名、及び、残基並び情報
- b) 二面角情報
- c) ジスルフィド結合情報
- d) 環状分子情報

## 2-1-1 PDB 形式ファイル

標準的な PDB 形式ファイルを使用することができます。ジスルフィド結合を持つ分子の計算を行う場合には、通常の PDB の SSBOND 行の書式に従って定義します。環状分子の計算を行う場合には、PDB の LINK 行の書式に従い定義します。また、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います。

以下に、PDB ファイル例を示します。ファイルフォーマットについては web サイト (<http://www.wwpdb.org/documentation/format33/v3.3.html>) 等をご参照下さい。

```
SSBOND  1 CYS A   6   CYS A  11
LINK     N  GLU A   4             C  THR A  21   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
(途中省略)
TER
```

図 1. PDB 入力ファイル例

本プログラムでは、PDB ファイル中の ATOM、HETATM キーワード、SSBOND キーワード、LINK キーワードを読み込み、処理を行います。

## (1) ATOM、HETATM キーワード情報

下記の項目を読み込みます。

No.	位置	内容	データ例
1	1 - 6	ATOM/HETATM	ATOM
2	7 - 11	原子の通し番号	20
3	13 - 16	原子名	N
4	17	Alternate location 識別子	
5	18 - 21	残基名※	GLU
6	22	鎖名	A
7	23 - 26	残基番号	4
8	27	残基の挿入コード	
9	31 - 38	原子の X 座標の値	33.037
10	39 - 46	原子の Y 座標の値	-5.952
11	47 - 54	原子の Z 座標の値	10.469

## ※残基名について

中性の ARG、LYS、ASP、GLU など残基を含むトポロジーファイルを作成する場合には、入力 PDB ファイルの残基名を変更した上で tplgeneX を実行する必要があります。以下の表に従い、残基名を変更して tplgeneX の処理を実行して下さい。

No.	残基名	変更後残基名
1	ARG(塩基性)	ARN(中性)

2	LYS(塩基性)	LYN(中性)
3	ASP(酸性)	ASH(中性)
4	GLU(酸性)	GLH(中性)
5	HIS( $\delta$ 位に水素付加)	HISE( $\epsilon$ 位に水素付加)
6	HIS( $\delta$ 位に水素付加)	HIS+( $\delta$ 、 $\epsilon$ 位に水素付加)
7	CYS	CYM(マイナス電荷のCYS)

## (2) SSBOND キーワード情報

下記の項目を読み込みます。

No.	位置	内容	データ例
1	1 - 6	SSBOND	SSBOND
2	8 - 10	通し番号	1
3	12 - 14	残基名(CYS)	CYS
4	16	鎖名	A
5	18 - 21	残基番号	6
6	22	挿入コード	
7	26 - 28	残基名(CYS)	CYS
8	30	鎖名	A
9	32 - 35	残基番号	11
10	36	挿入コード	

## (3) LINK キーワード情報

下記の項目を読み込みます。

No.	位置	内容	データ例
1	1 - 6	LINK	LINK
2	13 - 16	原子1の原子名	C
3	17	原子1のAlternate Location 識別子	
4	18 - 20	原子1の残基名	ALA
5	22	原子1の鎖名	A
6	23 - 26	原子1の残基番号	1
7	27	原子1の挿入コード	
8	43 - 46	原子2の原子名	N
9	47	原子2のAlternate Location 識別子	
10	48 - 50	原子2の残基名	LYS
11	52	原子2の鎖名	A
12	53 - 56	原子2の残基番号	2
13	57	原子2の挿入コード	

※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います。

## 2-1-2 PDBx/mmCIF 形式ファイル

tplgeneX では、PDBx/mmCIF 形式ファイルを使用することができます。以下にファイル例をします。

PDBx/mmCIF 形式のファイルフォーマットについては web サイト (<http://mmcif.wwpdb.org/>) をご参照下さい。

```

data_207L
#
_entry.id 207L
#
(略)
#
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
_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
_struct_conn.pdbx_value_order
disulf1 disulf ? A CYS 6 SG ? ? ? 1_555 A CYS 128 SG ? ? ? A CYS 6 A CYS 128 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.020 ?
disulf2 disulf ? A CYS 30 SG ? ? ? 1_555 A CYS 116 SG ? ? ? A CYS 30 A CYS 116 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.062 ?
disulf3 disulf ? A CYS 65 SG ? ? ? 1_555 A CYS 81 SG ? ? ? A CYS 65 A CYS 81 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.059 ?
covale1 covale ? A CYS 95 SG ? ? ? 1_555 B SC2 . SG ? ? ? A CYS 95 A SC2 200 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.031 ?

```



```

disulf7 disulf ? A CYS 78 SG ? ? ? 1_555 A CYS 95 SG ? ? A CYS 78 A CYS 95 1_555 ? ? ? ? ? ? 1.992 ?
disulf8 disulf ? B CYS 6 SG ? ? ? 1_555 B CYS 104 SG ? ? B CYS 6 B CYS 104 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.171 ?
disulf9 disulf ? B CYS 8 SG ? ? ? 1_555 B CYS 35 SG ? ? B CYS 8 B CYS 35 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.150 ?
disulf10 disulf ? B CYS 19 SG ? ? ? 1_555 B CYS 34 SG ? ? B CYS 19 B CYS 34 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.083 ?
disulf11 disulf ? B CYS 29 SG ? ? ? 1_555 B CYS 46 SG ? ? B CYS 29 B CYS 46 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.129 ?
disulf12 disulf ? B CYS 58 SG ? ? ? 1_555 B CYS 84 SG ? ? B CYS 58 B CYS 84 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.193 ?
disulf13 disulf ? B CYS 68 SG ? ? ? 1_555 B CYS 83 SG ? ? B CYS 68 B CYS 83 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.163 ?
disulf14 disulf ? B CYS 78 SG ? ? ? 1_555 B CYS 95 SG ? ? B CYS 78 B CYS 95 1_555 ? ? ? ? ? ? 2.236 ?
covale1 covale ? A PCA 1 C ? ? ? 1_555 A LYS 2 N ? ? A PCA 1 A LYS 2 1_555 ? ? ? ? ? ? 1.326 ?
covale2 covale ? B PCA 1 C ? ? ? 1_555 B LYS 2 N ? ? B PCA 1 B LYS 2 1_555 ? ? ? ? ? ? 1.313 ?
#
(略)
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 . LYS A 1 1 ? 1.432 19.265 22.053 1.00 12.18 ? ? ? ? ? ? 1 LYS A N 1
ATOM 2 C CA . LYS A 1 1 ? 1.849 20.104 20.904 1.00 12.88 ? ? ? ? ? ? 1 LYS A CA 1
ATOM 3 C C . LYS A 1 1 ? 3.144 19.597 20.321 1.00 11.66 ? ? ? ? ? ? 1 LYS A C 1
ATOM 4 O O . LYS A 1 1 ? 3.942 19.006 21.092 1.00 11.61 ? ? ? ? ? ? 1 LYS A O 1
ATOM 5 C CB . LYS A 1 1 ? 1.938 21.541 21.364 1.00 16.57 ? ? ? ? ? ? 1 LYS A CB 1
ATOM 6 C CG . LYS A 1 1 ? 3.207 22.142 21.894 1.00 17.77 ? ? ? ? ? ? 1 LYS A CG 1
ATOM 7 C CD . LYS A 1 1 ? 3.248 23.657 21.952 1.00 18.98 ? ? ? ? ? ? 1 LYS A CD 1
ATOM 8 C CE . LYS A 1 1 ? 4.363 24.284 21.131 1.00 21.50 ? ? ? ? ? ? 1 LYS A CE 1
ATOM 9 N NZ . LYS A 1 1 ? 4.788 25.625 21.644 1.00 22.20 ? ? ? ? ? ? 1 LYS A NZ 1
ATOM 10 N N . VAL A 1 2 ? 3.368 19.768 19.031 1.00 13.19 ? ? ? ? ? ? 2 VAL A N 1
ATOM 11 C CA . VAL A 1 2 ? 4.583 19.369 18.329 1.00 12.54 ? ? ? ? ? ? 2 VAL A CA 1
ATOM 12 C C . VAL A 1 2 ? 5.376 20.673 18.106 1.00 12.29 ? ? ? ? ? ? 2 VAL A C 1
(略)

```

図 2. PDBx/mmCIF フォーマットファイルの例

本プログラムでは、以下の情報を読み込みます。

- (1) ”\_entry.id” キーワード情報  
分子名を読み込みます。
- (2) ”\_atom\_site.” キーワード情報  
“ATOM”、“HETATM” の項目名を読み込みます。
- (3) “\_struct\_conn.” キーワード情報  
“disulf”、“covale”、“metalc” の項目名を読み込みます。その他 hydrog(水素結合) 情報などは今回の読み込み対象外とします。
- (4) “ATOM”、“HETATM” キーワード情報  
スペース区切りで下記の項目を読み込む。

No.	項目名	データ例
1	group_PDB	ATOM
2	id	1
3	type_symbol	N
4	label_atom_id	N
5	label_alt_id	.
6	label_comp_id	LYS
7	label_asym_id	A
8	label_entity_id	1
9	label_seq_id	1
10	pdtx_PDB_ins_code	?
11	Cartn_x	1.432
12	Cartn_y	19.265
13	Cartn_z	22.053
14	occupancy	1.00
15	B_iso_or_equiv	12.18
16	Cartn_x_esd	?
17	Cartn_y_esd	?
18	Cartn_z_esd	?
19	occupancy_esd	?
20	B_iso_or_equiv_esd	?
21	pdtx_formal_charge	?
22	auth_seq_id	1
23	auth_comp_id	LYS
24	auth_asym_id	A
25	auth_atom_id	N
26	pdtx_PDB_model_num	1

## (5) “disulf”、“covale”、“metalc” キーワード情報

No.	項目名	データ例 1	データ例 2	データ例 3
1	id	disulf1	covale1	metalc1
2	conn_type_id	disulf	covale	metalc
3	pdbx_PDB_id	?	?	?
4	ptnr1_label_asym_id	A	A	B
5	ptnr1_label_comp_id	CYS	PCA	ZN
6	ptnr1_label_seq_id	6	1	.
7	ptnr1_label_atom_id	SG	C	ZN
8	pdbx_ptnr1_label_alt_id	?	?	?
9	pdbx_ptnr1_PDB_ins_code	?	?	?
10	pdbx_ptnr1_standard_comp_id	?	?	?
11	ptnr1_symmetry	1_555	1_555	1_555
12	ptnr2_label_asym_id	A	A	E
13	ptnr2_label_comp_id	CYS	LYS	HOH
14	ptnr2_label_seq_id	104	2	.
15	ptnr2_label_atom_id	SG	N	0
16	pdbx_ptnr2_label_alt_id	?	?	?
17	pdbx_ptnr2_PDB_ins_code	?	?	?
18	ptnr1_auth_asym_id	A	A	A
19	ptnr1_auth_comp_id	CYS	PCA	ZN
20	ptnr1_auth_seq_id	6	1	301
21	ptnr2_auth_asym_id	A	A	A
22	ptnr2_auth_comp_id	CYS	LYS	HOH
23	ptnr2_auth_seq_id	104	2	409
24	ptnr2_symmetry	1_555	1_555	1_555
25	pdbx_ptnr3_label_atom_id	?	?	?
26	pdbx_ptnr3_label_seq_id	?	?	?
27	pdbx_ptnr3_label_comp_id	?	?	?
28	pdbx_ptnr3_label_asym_id	?	?	?
29	pdbx_ptnr3_label_alt_id	?	?	?
30	pdbx_ptnr3_PDB_ins_code	?	?	?
31	details	?	?	?
32	pdbx_dist_value	2.366	2.366	1.897
33	pdbx_value_order	?	?	?

## 2-1-3 DIHED 形式ファイル

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 形式ファイルを使用するのが有効です。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、環状分子情報を書くだけで tplgeneX による計算を行うことができます。二面角情報が書かれていない場合は、伸びた鎖構造のトポロジーを生成します。二面角情報が書かれていた場合には、それらの値に従った鎖構造を生成します。

DIHED 形式ファイル中アミノ酸残基は以下のキーワードを入力します。環状分子を計算する場合は 1 行目にキーワード 'PRE>CIRCULAR' キーワードを指定します。

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持つ場合にはキーワード 'PRE>SSBOND' を指定します。次の行以降に、結合している残基番号を指定します。残基番号はフリーフォーマットで書くことができます。

PRE>SSBOND	: この分子が SS 結合を持つことを示す。
3 9	: 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書きます。アミノ酸残基情報は、キーワード 'PRE>SEQUENCE' を指定し、その次の行から N 末端側から順次、アミノ酸名を 3 文字表記で入力します。1 行に 1 つのアミノ酸名を書いて下さい。

PRE>SEQUENCE	: 以下にアミノ酸配列を記述することを示す。
ASP	} ASP-LYS-CYS の順番で並んでいる。
LYS	
CYS	

最後に二面角情報を記述します。キーワード 'PRE>DIHEDRAL-ANGLES' で指定し、次の行から N 末端から C 末端までのアミノ酸残基の二面角を  $\phi$ 、 $\psi$ 、 $\omega$ 、 $\chi_1$ 、 $\chi_2$ 、の順番に二面角を書いていきます。1 行ごとに 10 個以内の角度値を記述します。この二面角情報はフリーフォーマットで書くことができます。

PRE>DIHEDRAL-ANGLES	: 以下に二面角の角度情報記述することを示す。
180 180 180 0	} 1~3 残基目の $\phi$ 、 $\psi$ 、 $\omega$ をそれぞれ 180 と指定している。
180 180 180 0	
180 180 180 0	

例として、DODECA-PEPTIDE の DIHED 形式ファイルは以下のように書くことができます。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ます。

```
PRE>SSBONDS
  3   9           : 3-9 残基目がジスルフィド結合していることを示します。
PRE>SEQUENCE
ASP                : 1
LYS                : 2
CYS                : 3 -----+
CYS                : 4         |
HIS                : 5         |
HIS                : 6         |   ジスルフィド結合
LEU                : 7         |
TRP                : 8         |
CYS                : 9 -----+
GLN                : 10
GLU                : 11
GLU                : 12
```

図 3 . DIHED フォーマットファイルの例

## 2-2 カ場データベースファイル

高分子トポロジージェネレータ tplgeneX では、いくつかのカ場データベースファイルを用意しています。

タンパク質の計算に関しては、AMBER parm96、及び、parm99、CHARMm19、及び、CHARMm22 に対応しています。核酸の計算に関しては AMBER parm96、及び、parm99 に対応しています。以下に各カ場データベースファイル一覧を示します。

また、金属・水の計算に対応するため、金属・水用のデータベースファイルを作成します。

また、入力 PDB で低分子の座標情報を含む場合、対応する低分子のトポロジーファイルを指定する必要があります。

## 2-2-1. データベースファイル一覧

## タンパク質計算用カ場データベース

C96_aa.tpl	AMBER parm96 に対応した DB ファイル
C99_aa.tpl	AMBER parm99 に対応した DB ファイル
C99_aa_SB.tpl	AMBER parm99 SB に対応した DB ファイル
charmm19_aa_all.tpl	CHARMm19 に対応した DB ファイル
charmm22_aa_all.tpl	CHARMm22 に対応した DB ファイル
OPLS_aa.tpl	OPLS United Atom Model に対応した DB

## 核酸計算用カ場データベース

C96_na.tpl	AMBER parm96 に対応した DB ファイル
C99_na.tpl	AMBER parm99 に対応した DB ファイル
C99_na_bsc0.tpl	AMBER parm99 SB に対応した DB ファイル

## 金属・水分子計算用カ場データベース

metals.tpl	金属・水分子用 DB ファイル (AMBER parm99 ベース)
------------	---------------------------------------

低分子トポロジーファイル(入りに低分子の座標情報が存在する場合のみ)  
ファイル名は任意で、対応するトポロジーファイルを指定します。

## 2-2-2. 対応残基情報

以下に、各タンパク質計算用カ場データベースファイル共通に含まれる残基情報について示します。

ALA	アラニン
ARG+	アルギニン
ASN	アスパラギン
ASP-	アスパラギン酸(酸性)
CYS	システイン
CYSS	システイン(ジスルフィド結合用)
GLN	グルタミン

GLU-	グルタミン酸(酸性)
GLY	グリシン
HIS	ヒスチジン
HISE	ヒスチジン(ε位に水素付加)
HIS+	ヒスチジン(δ、ε位に水素付加)
ILE	イソロイシン
LEU	ロイシン
LYN	リジン(中性)
LYS+	リジン(塩基性)
MET	メチオニン
PHE	フェニルアラニン
PRO	プロリン
SEC	セレノシステイン
SER	セリン
THR	スレオニン
TRP	トリプトファン
TYR	チロシン
VAL	バリン

以下に、C96\_aa. tp1 ファイルに記載されている残基について示します。

ABA	2-アミノブタン酸
ASH	アスパラギン酸(中性)
CYM	システイン(S-)
GLH	グルタミン酸(中性)
LYN	リジン(中性)
NLE	2-アミノヘキササン酸
SEC	セレノシステイン
SEP	SEP
THP	THP
TYP	TYP

以下に、C99\_aa. tp1 ファイルに記載されている残基について示します。

ABA	2-アミノブタン酸
ADA+	非対称ジメチルアルギニン
ARN	ARN
ASH	アスパラギン酸(中性)
CSO	CSO
CYM	システイン(S-)
DML+	ジメチルリジン
GLH	グルタミン酸(中性)
HYP	HYP
LYN	リジン(中性)
MMA+	メチルアルギニン
MML+	メチルリジン
NLE	2-アミノヘキササン酸
SDA+	対称ジメチルアルギニン
SEC	セレノシステイン
SEP	SEP
THP	THP

TML+ トリメチルリジン  
TYP TYP

以下に、核酸計算用力場ファイルに記載されている残基について示します。

ADE、AD、A アデノシンヌクレオチド  
GUA、GU、G グアノシンヌクレオチド  
CYT、CY、C シチジンヌクレオチド  
URA、UR、U ウリジンヌクレオチド  
DAD、DA デオキシアデノシンヌクレオチド  
DGU、DG デオキシグアノシンヌクレオチド  
DCY、DC デオキシシチジンヌクレオチド  
DTH、DT デオキシチミンヌクレオチド

以下に、metals. tpl ファイルに記載されている残基について示します。

F フッ素  
Cl 塩素  
Br 臭素  
I ヨウ素  
Li リチウム  
Na ナトリウム  
Mg マグネシウム  
K カリウム  
Ca カルシウム  
Cu 銅  
Fe 鉄  
Zn 亜鉛



## 2-3 出力ファイル

高分子トポロジージェネレータ tplgeneX により得られる情報は以下の通りです。

- a) 不足原子(主に水素)を補った全系のトポロジー情報(トポロジーファイル)
- b) 不足原子(主に水素)を補った全系のカーテシアン座標(座標ファイル)

これらの 2 つのファイルを用いて、多くのコンフォメーションエネルギー計算を行うことができます。

PDB 形式の入力ファイルを用いる場合は、複数のアミノ酸鎖、及び、核酸鎖のトポロジーを作成する事ができます。また、アミノ酸鎖と低分子、金属イオン、水分子等を含むトポロジーを一度に作成することができます。

DIHED 形式の入力ファイルを用いる場合には、タンパク質 1 分子のアミノ酸鎖のトポロジーを作成することができます(核酸や金属イオン、水分子等を含むトポロジーの作成は未対応です)。

## ①PDB ファイル、PDBx/mmCIF ファイルの出力形式について

tplgeneX 実行時にオプション” -stdpdb” を指定した場合、出力 PDB は標準形式の残基名 (ARG、GLU、CYS など) で出力されます。

同様に、オプション” -presto” を指定した場合には、出力 PDB は従来の presto 形式の残基名 (ARG+, GLU-, CYSS など) で出力されます。(オプションを指定しない場合は、” -presto” オプション指定時と同じ動作をします。)

両者の違いは以下の通りとなります。

表. presto 形式、標準形式出力の PDB 出力の違いについて

相違点	presto 形式出力	標準形式出力
残基名	ARG+, LYS+, ASP-, GLU-, HISE, HIS+, CYSS など残基によって 4 文字表記で出力される。	全ての残基について 3 文字表記で出力される。

### 3. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX のディレクトリ構成

プログラムは、ファイル名 `tplgeneXyymmdd.tar.gz` (`yymmdd` には、年月日が入ります) で圧縮した形で配布しています。

解凍しますと、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。以下に各ディレクトリの説明をします。

```

tplgeneXyymmdd+---tplgeneX----+---src    : 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の
|                                     |      ソースファイル
|                                     +---DB    : tplgeneX の力場 DB ファイル
|                                     |
|                                     +---bin    : 実行ファイル保存ディレクトリ
+---LibMyPresto  : PDBx/mmCif、PDB 変換ライブラリソースファイル
|
+---sample-----+-----tplgeneX_sample : tplgeneX 用サンプルデータ

```

#### 3-1 tplgeneX/src ディレクトリ

tplgeneX のソースを置いているディレクトリです。プログラムの修正や、コンパイルはここでを行います。ここで `make` を実行すると、実行ファイル `tplgeneX` が生成されます。

#### 3-2 tplgeneX/DB ディレクトリ

tplgeneX に使用する力場 DB ファイルを置いているディレクトリです。Amber 力場用の力場 DB ファイル (アミノ酸用 `C96_aa.tpl`, `C99_aa.tpl`, 核酸用 `C96_na.tpl`, `C99_na.tpl`) と、CHARMM 力場用の力場 DB ファイル (アミノ酸用 `charmm19_aa_all.tpl`, `charmm22_aa_all.tpl`)、金属・水分子用の DB ファイル (`metals.tpl`) を標準で置いています。

#### 3-3 sample/tplgeneX\_sample ディレクトリ

tplgeneX の計算に必要な、PDB 座標ファイル、DIHED ファイルのサンプル入力ファイルを置いてあるディレクトリです。

#### 3-4 LibMyPresto ディレクトリ

PDBx/mmCIF から PDB へ、或いは、PDB から PDBx/mmCIF へ座標フォーマットを変換する機能を持ったライブラリのプログラムソースを置いているディレクトリです。

## 4. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX のインストール

### (1) プログラムの解凍

プログラムは、ファイル名 `tplgeneXyymmdd.tar.gz` (`yymmdd` は年月日が入ります) で圧縮した形で配布しています。  
まず、以下のコマンドにて解凍作業を行います。(下線部が入力部分です)

```
%tar -xzvf tplgeneXyymmdd.tar.gz
```

解凍しますと、3章に示したディレクトリ構成にて、各種ファイルが作成されます。

### (2) 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。  
`tplgeneXyymmdd/tplgeneX/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。  
C コンパイラは以下のコマンド(下線部が入力部分です)でパスを知ることができます。

```
%which cc  
或いは、  
%which gcc
```

例) C コンパイラが `/usr/local/bin/cc` にあり、`/usr/bin` に実行ファイル `tplgeneX` をインストールしたい場合

Makefile

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

Makefile を編集した後、以下のコマンドを実行しますと(下線部が入力部分です)、`tplgeneXyymmdd/tplgeneX/src` 配下に実行ファイルである `tplgeneX` が作成されます。

```
%make
```

以下のコマンドを実行しますと(下線部が入力部分です)、Makefile 中の変数 `BIN_DIR` で指定したパスに実行ファイル `tplgeneX` をインストールします。

※変数 `BIN_DIR` で指定したパスによっては、`root` 権限が必要になる場合があります。

```
%make install
```

## 5. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の使用法

本章では高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の使用法について示します。なお、以下の説明は、4章でインストールした実行ファイル tplgeneX へのパスが通っているものとして、進めていきます。

### 5-1 環境設定

高分子トポロジージェネレータを使用するには、入力ファイル、力場 DB ファイルが必要となります。入出力ファイル、力場 DB ファイルの置き場所を固定して使用したい場合には以下の環境変数にパスを設定してください。

※環境変数が設定されていない場合は、カレントディレクトリを参照します。

<高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の環境変数について>

・ TPL\_DB\_PATH           : tplgeneX 力場 DB 用ディレクトリ

#### 設定例 1) bash の場合

ホームディレクトリの .bashrc に以下の行を加えます。

(YYY は tplgeneXyymmdd.tar.gz を解凍したパス付きディレクトリ名となります。)

```
export TPL_DB_PATH=/YYY/tplgeneXyymmdd/tplgeneX/DB
```

.bashrc を保存した後、以下のコマンドを実行すると、環境変数 TPL\_DB\_PATH が設定されます (下線部が入力部分です)。

```
%source .bashrc
```

#### 設定例 2) csh の場合

ホームディレクトリの .cshrc に以下の行を加えます。

(YYY は tplgeneXyymmdd.tar.gz を解凍したパス付きディレクトリ名となります。)

```
setenv TPL_DB_PATH /YYYY/tplgeneXyymmdd/tplgeneX/DB
```

.cshrc を保存した後、以下のコマンドを実行すると、環境変数 TPL\_DB\_PATH が設定されます (下線部が入力部分です)。

```
%source .cshrc
```

現在使用しているシェルは以下のコマンドで確認できます (下線部が入力部分です)。

```
%ps
```

## 5-2 入力ファイルの準備

tplgeneX は PDB、PDBx/mmCIF、或いは、DIHED ファイルを入力ファイルとして必要となります。tplgeneX は入力ファイルを保存した場所で実行します。

また、5-1 で力場 DB ディレクトリへのパスを設定した場合は、そのディレクトリに、設定していない場合は、カレントディレクトリに力場 DB ファイルを置いてください。配布時の力場 DB ファイルは tplgeneXyymmdd/tplgeneX/DB に用意しています。

## 5-3 計算の実行

tplgeneX には以下の 2 つの実行方法があります。

- (1) オプションで指定する方法
- (2) 対話的にデータを入力する方法

それぞれの実行方法について説明します。

### 5-3-1 対話形式で実行する場合

オプションを指定しないで、プログラムを実行した場合、対話的に各種ファイル名等の入力を促すメッセージが表示されます。(下線部が入力部分です)

```
%tplgeneX
```

プログラムを実行しますと以下の項目について順次入力していきます。

#### ① 入力座標ファイル種別の選択

入力座標ファイル種別を選択する旨のメッセージが表示されます。1 から 3 のいずれかを選択します。

```
%% Enter Inputfile Type or the number. %%  
1 : pdb  
2 : pdbx (PDBx/mmCIF)  
3 : dihed (for Amino Acid Only)
```

## ②力場 DB の種別の選択

次に力場データベースファイルを選択する旨のメッセージが表示されます。1~4 は tplgeneX プログラムに標準に添付されているファイルであり、ユーザ自身が修正、追加等をした DB ファイルを使用する場合には 9 を選択して下さい。

```
%% Enter Forcefield Type or the number. %%
 1 : C99
 2 : C96
 3 : charmm22(for Amino Acid Only)
 4 : charmm19(for Amino Acid Only)
 9 : other Force Field(Modified AMBER FF, etc.)
```

上記で 9 を選択した場合には、力場データベースファイルの名称を入力する旨のメッセージが表示されますので、ファイル名を入力して下さい。

```
Please choose from the following files .
and write the File Name .
/YYY/tplgeneX/DB/
C96_aa.tpl  C99_aa_SB.tpl      C99_na_bsc0.tpl      charmm22_aa_all.tpl
C96_na.tpl  C99_aa_fujitani.tpl  OPLS_aa.tpl          metals.tpl
C99_aa.tpl  C99_na.tpl           charmm19_aa_all.tpl
```

## ③入力（座標）ファイル名

次に、入力ファイル(座標ファイル)名を指定します。画面上には、カレントディレクトリ配下のファイルの一覧が表示されますので、ファイル一覧を参考にし、入力ファイルディレクトリ配下にあるファイル名を入力します。

```
%% Enter an Input Coordinate or Dihed File Name. %%
```

## ④出力（座標）ファイル種別

次に、出力座標ファイルの種類を選択します。PDB 形式、PDBx/mmCIF 形式の 2 種類を選択することができます。

```
%% Enter Outputfile Type or the number. %%
 1 : pdb
 2 : pdbx
```

## ⑦出力（座標）ファイル名

続いて、出力 PDB ファイル名を指定します。このファイルはカレントディレクトリに作成されます。

```
%% Enter an Output Coordinate File Name. %%
```

⑧出力トポロジーファイル名

次に、出力トポロジーファイル名を指定します。このファイルはカレントディレクトリ配下に作成されます。

```
%% Enter an Output Topology File Name. %%
```

⑨水モデルの選択

入力 PDB ファイル内に水分子が含まれる場合には、水モデルの選択を行う必要があります。TIP3P モデルを使用する場合には 1 を、TIP4P モデルを使用する際には 2 を選択します。

```
%% Select Water Model. %%  
1: tip3p, 2: tip4p
```

⑩低分子トポロジーファイルの読み込み

入力 PDB ファイル内にリガンド分子が含まれる場合には、対象となるリガンド分子のトポロジーファイルを指定する必要があります。

```
Ligand molecule was found in PDB file.  
%% Input Topology Filename of Ligand Molecule(LGD). %%
```

上記の情報を入力すると計算を開始します。計算が終了しますと、次のメッセージが画面に表示されます。

```
%% Program is done. %%  
%% This program ended normally. %%
```

## 5-3-2 オプションを用いて実行する場合

実行時にオプションを用いて各種ファイル名を指定することによって、対話的に入力する部分を省略することができます。

```
%tplgeneX [ オプション ]
  -ipdb      input_coord
             座標ファイル名 input_coord の PDB ファイルを読み込みます
  -ipdbx     input_coord
             座標ファイル名 input_coord の PDBx/mmCIF ファイルを読み込みます
  -idihed    input_coord
             座標ファイル名 input_coord の DIHED ファイルを読み込みます
  -opdb      input_coord
             座標ファイル名 input_coord の PDB ファイルを出力します
  -opdbx     input_coord
             座標ファイル名 input_coord の PDBx/mmCIF ファイルを出力します
  -otpl      output_tpl
             トポロジーファイル名 output_tpl ファイルを出力します
  -db        db
             力場 DB タイプ (C99、C96、charmm22、charmm19)、又は
             力場 DB ファイル名を<db>に指定します
  -lig       n LGx LGx.tpl
             既に n 番目のリガンド (LGx) のトポロジーが作成されて LGx.tpl と
             いうファイルに記載されている場合に指定します。(n=1, 2, ...)
             としてリガンドの種類だけ繰り返すことができます。
  -water     [tip3p | tip4p]
             入力ファイル内に水情報を含む場合に、水モデルの力場を
             選択します(デフォルトでは tip3p を選択)
             tip3p : tip3p 水モデルを選択します
             tip4p : tip4p 水モデルを選択します
  -ss
             ジスルフィド結合自動認識を行います
  -term
             ペプチドの N, C 末端を ACE, NME 残基で修飾します
  -stdpdb
             残基名について、標準形式で PDB 又は PDBx/mmCIF ファイルを
             出力します
  -presto
             残基名について、presto 形式で PDB 又は PDBx/mmCIF ファイルを
             出力します
  -h, -help
             ヘルプメッセージを表示します
```

## ※1. リガンドを含む PDB ファイルを読み込んだ場合の処理について

入力 PDB ファイルのリガンド座標の直前に「REMARK ORIGTPL リガントトポロジーファイル名」(以下、REMARK ORIGTPL 行とする)の記述がない場合、リガントトポロジーファイル名を対話的に入力することになります。記述がある場合、リガントトポロジーファイルが自動的に読み込まれます。



## 6. 高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の計算例

高分子トポロジージェネレータ tplgeneX の計算例を示します。6章の計算例は実行ファイル tplgeneX のあるディレクトリにパスが通っているものとし、tplgeneX 用の環境変数には以下が設定されているものとします。

〈高分子トポロジージェネレータ tplgeneX 用の環境変数〉

・ TPL\_DB\_PATH                    /YYY/tplgeneXyymmdd/tplgeneX/DB

(yymmdd は年月日、YYY は tplgeneXyymmdd.tar.gz を解凍したパス付きディレクトリ名となります。)

### 6-1 ACE-ALA-ALA-NME 分子の計算方法(オプションを指定して計算を行う場合)

①以下のコマンドでプログラムを起動します。

```
%tplgeneX -ipdb ACE-ALA-ALA-NME.pdb -opdb ACE-ALA-ALA-NME-amber.pdb -otpl
ACE-ALA-ALA-NME-amber.tpl -db C96
```

今回の計算例)

分子種	ペプチド
入力ファイル形式	PDB
力場 DB ファイル	C96_aa.tpl
入力座標ファイル	ACE-ALA-ALA-NME.pdb
出力座標ファイル	ACE-ALA-ALA-NME-amber.pdb
出力トポロジーファイル	ACE-ALA-ALA-NME-amber.tpl

オプションの意味)

-ipdb <入力座標ファイル>	: 指定した PDB 形式の座標ファイルを読み込みます。 必須項目です。
-opdb <出力座標ファイル>	: PDB 形式の座標ファイルを出力します。 本オプションは省略可能です。省略した場合、 xxx_tpl.pdb (xxx は入力座標ファイルの名称 (拡張子除く)) が出力されます。
-otpl <出力 tpl ファイル>	: tpl ファイルを出力します。 本オプションは省略可能です。省略した場合、 xxx.tpl (xxx は入力座標ファイルの名称 (拡張子除く)) が出力されます。
-db <力場 DB ファイル>	: 指定した力場 DB ファイルを読み込みます。 本オプションは省略可能です。省略した場合、 C99_aa.tpl を読み込みます。

②以上により計算を開始します。正常終了した場合には以下のメッセージが出力されます。

```
%% Program is done. %%
%% This program ended normally. %%
```

## 6-2 ACE-ALA-ALA-NME 分子の計算方法(対話形式で計算を行う場合)

①以下に示す PDB データを用いて計算を行います。入力 PDB データファイルを入力ディレクトリに置きます。このファイル名を ACE-ALA-ALA-NME. pdb とします。

ATOM	1	CA	ACE	1	-3.811	-0.502	0.471	1.00	0.00	C
ATOM	2	C	ACE	1	-2.354	-0.410	0.072	1.00	0.00	C
ATOM	3	O	ACE	1	-1.743	-1.403	-0.345	1.00	0.00	O
ATOM	4	1HA	ACE	1	-4.164	0.462	0.807	1.00	0.00	H
ATOM	5	2HA	ACE	1	-4.406	-0.818	-0.373	1.00	0.00	H
ATOM	6	3HA	ACE	1	-3.931	-1.217	1.272	1.00	0.00	H
ATOM	7	N	ALA	2	-1.649	0.885	0.183	1.00	0.00	N
ATOM	8	CA	ALA	2	-0.244	1.035	-0.187	1.00	0.00	C
ATOM	9	C	ALA	2	0.221	2.456	0.023	1.00	0.00	C
ATOM	10	O	ALA	2	-0.530	3.334	0.466	1.00	0.00	O
ATOM	11	CB	ALA	2	-0.094	0.568	-1.645	1.00	0.00	C
ATOM	12	H	ALA	2	-2.235	1.713	0.553	1.00	0.00	H
ATOM	13	HA	ALA	2	0.365	0.389	0.472	1.00	0.00	H
ATOM	14	1HB	ALA	2	-0.403	-0.487	-1.773	1.00	0.00	H
ATOM	15	2HB	ALA	2	-0.707	1.171	-2.342	1.00	0.00	H
ATOM	16	3HB	ALA	2	0.954	0.635	-1.993	1.00	0.00	H
ATOM	17	N	ALA	3	1.482	2.703	-0.281	1.00	0.00	N
ATOM	18	CA	ALA	3	2.069	4.031	-0.129	1.00	0.00	C
ATOM	19	C	ALA	3	3.519	4.033	-0.548	1.00	0.00	C
ATOM	20	O	ALA	3	4.081	3.015	-0.969	1.00	0.00	O
ATOM	21	CB	ALA	3	1.870	4.463	1.334	1.00	0.00	C
ATOM	22	H	ALA	3	2.053	1.864	-0.650	1.00	0.00	H
ATOM	23	HA	ALA	3	1.534	4.733	-0.796	1.00	0.00	H
ATOM	24	1HB	ALA	3	0.799	4.493	1.612	1.00	0.00	H
ATOM	25	2HB	ALA	3	2.369	3.775	2.044	1.00	0.00	H
ATOM	26	3HB	ALA	3	2.275	5.475	1.524	1.00	0.00	H
ATOM	27	N	NME	4	4.224	5.329	-0.437	1.00	0.00	N
ATOM	28	CA	NME	4	5.620	5.432	-0.830	1.00	0.00	C
ATOM	29	HN	NME	4	3.727	6.157	-0.082	1.00	0.00	H
ATOM	30	1HA	NME	4	6.256	5.102	-0.022	1.00	0.00	H
ATOM	31	2HA	NME	4	5.806	4.816	-1.697	1.00	0.00	H
ATOM	32	3HA	NME	4	5.861	6.457	-1.070	1.00	0.00	H
TER										

図 4. 入力 PDB データ、ACE-ALA-ALA-NME. pdb

②以下のようにしてプログラムを起動します。(下線部が入力部分です)

```
%tplgeneX
```

③まず始めに、入力ファイル書式の選択を行います。今回は PDB ファイルを選択するので、1 または pdb と入力します。(下線部が入力部分です。以下同様)

```
%% Enter Inputfile Type or the number. %%
```

```
1 : pdb
```

```
2 : pdbx
```

```
3 : dihed (for Amino Acid Only)
```

```
1
```

```
: 今回は PDB ファイルを読み込みます。
```

④次に、力場データベースを選択します。今回は AMBER C99\_aa.tpl 力場を使用するので、1 または C99 と入力します。

```
%% Enter Forcefield Type or the number. %%
1 : C99
2 : C96
3 : charmm22(for Amino Acid Only)
4 : charmm19(for Amino Acid Only)
9 : other Force Field(Modified AMBER FF, etc.)
1 : 今回は 1 : C99 を選択します。
```

⑤次に、入力座標ファイル名を入力します。カレントディレクトリの各ファイル名が表示されるので、計算するファイルのファイル名を入力します。今回は ACE-ALA-ALA-NME.pdb を入力します。

```
%% Enter an Input Coordinate or Dihed File Name. %%
20aa.dih          Lig.pdb          circ_link.pdb
ACE-ALA-ALA-NME.pdb  Lig.tpl          circ_ss.pdb
ALA-GLU-VAL_metals.pdb  Pro-Lig-Complex.pdb  ss.pdb
ACE-ALA-ALA-NME.pdb : 計算したい分子の座標ファイル名を指定します。
```

⑥次に、出力ファイル書式を選択します。PDB 形式ファイルならば 1 または pdb と入力し、PDBx/mmCIF 形式ファイルならば 2 または pdbx と入力します。今回は PDB 形式ファイルを入力としているので、1、または pdb と入力します。

```
%% Enter Outputfile Type or the number. %%
1 : pdb
2 : pdbx
1 : 今回は PDB 形式ファイルなので、1 を入力します。
```

⑦次に、出力座標ファイル名を入力します。ファイルはカレントディレクトリに出力されます。今回の出力トポロジーファイル名は ACE-ALA-ALA-NME-amber.pdb とします。

```
%% Enter an Output Coordinate File Name. %%
ACE-ALA-ALA-NME-amber.pdb : 出力座標ファイル名を入力します。
```

⑧次に、出力トポロジーファイル名を入力します。出力座標ファイルと同様に、カレントディレクトリに出力されます。今回の出力トポロジーファイル名は ACE-ALA-ALA-NME-amber.tpl とします。

```
%% Enter an Output Topology File Name. %%
ACE-ALA-ALA-NME-amber.tpl : 出力トポロジーファイル名を入力します。
```

⑨以上の項目を入力し終わると、計算を開始します。正常終了した場合は以下のメッセージが出力されます。

```
%% Program is done. %%  
%% This program ended normally. %%
```

※なお、上記対話項目の入力値をファイルに保存し、リダイレクションを使用し処理を行うこともできます。リダイレクションを使用する場合には、上記③～⑧の内容を記載した入力ファイル(今回は ACE-ALA-ALA-NME.inp)を作成し tplgeneX を実行します。

入力ファイル ACE-ALA-ALA-NME.inp の例)

```
1  
1  
ACE-ALA-ALA-NME.pdb  
1  
ACE-ALA-ALA-NME_amber.pdb  
ACE-ALA-ALA-NME_amber.tpl
```

なお、ACE-ALA-ALA-NME.inp の数字の部分(入力ファイル書式、力場データベース、出力ファイル書式)は以下の様に記載しても問題ありません。

```
pdb  
C99  
ACE-ALA-ALA-NME.pdb  
pdb  
ACE-ALA-ALA-NME_amber.pdb  
ACE-ALA-ALA-NME_amber.tpl
```

実行コマンド)

```
%tplgeneX < ACE-ALA-ALA_NME.inp
```

## 6-3 DIHED 形式ファイルを用いての計算方法

①以下に示す DIHED 形式ファイルを用いて計算を行います。入力 DIHED 形式ファイルを入力ディレクトリに置きます。このファイル名を 20aa.dih とします。

```

PRE>SSBOND
  2  20
PRE>SEQUENCE
MET
CYS
ALA
VAL
LEU
ARG
GLN
PRO
LYS
CYS
VAL
LYS
LEU
ARG
ALA
LEU
HIS
SER
ALA
CYS
PRE>DIHEDRAL-ANGLES
  0.000 118.096 179.972-143.128 109.379-127.435 180.000  0.000  0.000  0.000
-114.365 66.763 180.000 -85.252  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
 -46.059 118.395-179.944 180.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
-80.689 117.647 179.944 164.961 180.000 180.000  0.000  0.000  0.000  0.000
-81.773 166.079 179.980-124.321 130.708 180.000 180.000  0.000  0.000  0.000
-87.553 -25.449 179.972 -66.124 -95.888 169.430 134.067 38.591 180.000 180.000
-156.217 151.615 180.000  57.337-157.333  9.254 180.000  0.000  0.000  0.000
 -61.239 123.138-180.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
 -63.486 175.967-179.966-117.070 -59.113-174.744 -72.817 180.000  0.000  0.000
-146.008 141.250 179.803 -74.439  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
-155.629 161.291 180.000 -59.617 180.000 180.000  0.000  0.000  0.000  0.000
-120.223 112.666-179.944 -82.025-146.607-170.638 113.023 180.000  0.000  0.000
 -81.744 100.025 179.929-117.650  70.205 180.000 180.000  0.000  0.000  0.000
-106.156 135.909-180.000 167.893 147.767-146.100-139.865 38.705 180.000 180.000
 -91.304 174.118-179.972 180.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
 -87.388 -49.332-180.000-110.711 153.178 180.000 180.000  0.000  0.000  0.000
-111.420  30.105 179.937 -56.161 164.727  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
-101.954 -20.577-179.980-177.881 180.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  65.170  13.811 179.972 180.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
-153.135 177.710 179.972 -76.710  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000

```

図 5. 入力 DIHED データ 20aa.dih

②入力ファイル 20aa\_dih. inp を作成します。

3	: 1→pdb、2→pdbx、3→dihed 入力ファイルタイプ選択
1	: 1→C99、2→C96、3→charmm22 カ場タイプの選択
20aa. dih	: 入力 dihed ファイル名。カレントディレクトリ配下のもの。
1	: 1→pdb、2→pdbx 出力ファイルタイプの選択
20aa_out. pdb	: 出力座標ファイル。
20aa_out. tpl	: 出力 tpl ファイル。

図 6. 設定ファイル 20aa\_dih. inp

なお、設定ファイル 20aa\_dih. inp は以下の内容でも同じことを示します。

dihed	: 1→pdb、2→pdbx、3→dihed 入力ファイルタイプ選択
C99	: 1→C99、2→C96、3→charmm22 カ場タイプの選択
20aa. dih	: 入力 dihed ファイル名。カレントディレクトリ配下のもの。
pdb	: 1→pdb、2→pdbx 出力ファイルタイプの選択
20aa_out. pdb	: 出力座標ファイル。
20aa_out. tpl	: 出力 tpl ファイル。

③20aa. dih、20aa\_dih. inp ファイルを保存したディレクトリでプログラムを起動します。  
(下線部が入力部分です)

```
%tplgeneX < 20aa_dih. inp
```

④以上により計算を開始します。正常終了した場合には以下のメッセージが出力されます。

```
%% Program is done. %%  
%% This program ended normally. %%
```

## 6-4 タンパク質、リガンド、金属、水分子を含む複合体の計算方法

①PDB データを用いて計算を行います。入力 PDB データファイルを入力ディレクトリに置きます。このファイル名を Pro-Lig-Complex.pdb とします。なお、リガンド構造を含むデータを入力する際には、以下の前処理が必要となります。

- ・リガンド構造について tplgeneL 処理を行い、PDB、トポロジーファイルを作成する。
- ・リガンド PDB ファイルの残基名を LGD とする。
- ・タンパク質 PDB とリガンド PDB を結合する。

今回の入力ファイル Pro-Lig-Complex.pdb は、上記の前処理を行ったものであり、別途リガントポロジーファイル Lig.tpl を準備している。

ATOM	1	N	ALA	A	2	13.964	-14.609	61.548	1.00	82.68	N
ATOM	2	CA	ALA	A	2	14.891	-14.051	60.569	1.00	82.33	C
ATOM	3	C	ALA	A	2	14.616	-12.579	60.235	1.00	81.01	C
ATOM	4	O	ALA	A	2	13.978	-12.343	59.197	1.00161	91	O
ATOM	5	CB	ALA	A	2	14.767	-14.765	59.199	1.00	83.76	C
ATOM	6	N	THR	A	3	15.134	-11.657	61.042	1.00	77.78	N
ATOM	7	CA	THR	A	3	14.968	-10.238	60.717	1.00	72.00	C
ATOM	8	C	THR	A	3	16.317	-9.702	60.235	1.00	60.86	C
ATOM	9	O	THR	A	3	17.196	-9.338	61.018	1.00112	79	O
ATOM	10	CB	THR	A	3	14.282	-9.380	61.758	1.00	75.26	C
ATOM	11	OG1	THR	A	3	13.757	-8.188	61.150	1.00148	22	O
ATOM	12	CG2	THR	A	3	15.182	-8.974	62.909	1.00	76.15	C
～省略～											
ATOM	3544	N	VAL	A	471	24.661	-14.998	57.852	1.00	17.63	N
ATOM	3545	CA	VAL	A	471	24.622	-16.039	56.827	1.00	19.46	C
ATOM	3546	C	VAL	A	471	23.416	-16.967	56.960	1.00	20.77	C
ATOM	3547	O	VAL	A	471	22.861	-17.408	55.949	1.00	22.69	O
ATOM	3548	CB	VAL	A	471	25.914	-16.883	56.971	1.00	23.77	C
ATOM	3549	CG1	VAL	A	471	25.897	-18.095	56.062	1.00	27.52	C
ATOM	3550	CG2	VAL	A	471	27.115	-15.996	56.665	1.00	29.97	C
ATOM	3551	OXT	VAL	A	471	23.121	-17.268	58.139	1.00	19.71	O
TER											
ATOM	1	N1	LGD		1	-1.980	1.840	-2.529	14.01	0.23	
ATOM	2	C2	LGD		1	-1.603	0.825	-1.556	12.01	0.05	
ATOM	3	C3	LGD		1	-1.166	1.426	-0.223	12.01	0.26	
ATOM	4	O4	LGD		1	-0.277	2.279	-0.209	16.00	-0.27	
ATOM	5	C5	LGD		1	-0.409	0.019	-2.096	12.01	0.00	
ATOM	6	C6	LGD		1	-0.693	-1.401	-2.576	12.01	-0.04	
ATOM	7	C7	LGD		1	0.538	-1.986	-3.254	12.01	-0.06	
ATOM	8	C8	LGD		1	-1.151	-2.279	-1.422	12.01	-0.06	
ATOM	9	N9	LGD		1	-1.723	0.948	0.881	14.01	-0.30	
ATOM	10	C10	LGD		1	-1.296	1.443	2.187	12.01	0.10	
～省略～											
HETATM	3569	ZN	ZN		472	-10.035	18.615	37.793	1.00	19.65	ZN
HETATM	3570	CA	CA		474	20.883	15.256	35.844	1.00	16.54	CA
～省略～											
TER											
HETATM	3577	O	HOH		2001	21.750	-11.482	51.703	1.00	14.55	O
HETATM	3578	O	HOH		2002	12.177	-1.930	54.218	1.00	21.64	O
HETATM	3579	O	HOH		2003	10.375	1.034	46.573	1.00	24.26	O
～省略～											

図 7. 入力 PDB ファイル Pro-Lig-Complex.pdb

②入力ファイル Pro-Lig-Complex.inp を作成します。

```

1           : 1→pdb、2→dihed ファイルの選択
2           : 1→C99、2→C96、3→charmm22 カ場タイプの選択
Pro-Lig-Complex.pdb : 入力 pdb ファイル名。
1           : 1→pdb、2→pdbx 出力ファイルタイプの選択
Pro-Lig-Complex_out.pdb : 出力 pdb ファイル。
Pro-Lig-Complex_out.tpl : 出力 tpl ファイル。
1           : 1→tip3p、2→tip4p 水モデルの選択
Lig.tpl     : リガンドのトポロジーファイル名を書きます。

```

図 8. 設定ファイル Pro-Lig-Complex.inp

③プログラムを起動します。(下線部が入力部分です)

```
%tplgeneX < Pro-Lig-Complex.inp
```

④以上により計算を開始します。正常終了した場合には以下のメッセージが出力され、出力ファイルが出力ディレクトリに出力されます。

```
%% Program is done. %%
%% This program ended normally. %%
```

※なお、入力 PDB ファイルのリガンド座標の直前の行に、“REMARK ORIGTPL”がある場合には、その行に記載されているリガンドトポロジーファイルを自動で読み込むために、リガンドトポロジーファイル名の入力は不要となります。

```

ATOM      1  N   ALA A  2      13.964 -14.609  61.548  1.00 82.68      N
ATOM      2  CA  ALA A  2      14.891 -14.051  60.569  1.00 82.33      C
ATOM      3  C   ALA A  2      14.616 -12.579  60.235  1.00 81.01      C
ATOM      4  O   ALA A  2      13.978 -12.343  59.197  1.00161.91    O
ATOM      5  CB  ALA A  2      14.767 -14.765  59.199  1.00 83.76      C
~省略~
TER
REMARK ORIGTPL Lig.tpl
ATOM      1  N1  LGD   1      -1.980   1.840 -2.529 14.01  0.23
ATOM      2  C2  LGD   1      -1.603   0.825 -1.556 12.01  0.05
ATOM      3  C3  LGD   1      -1.166   1.426 -0.223 12.01  0.26

```

図 9. リガンドトポロジーファイル名の入力が不要の例)



## 6-5 PDBx/mmCIF ファイルを入力とする場合の計算方法

①以下のコマンドでプログラムを起動します。

```
%tplgeneX -ipdbx 2bfi.cif -opdb 2bfi_out.pdb -otpl 2bfi_out.tpl -db C99
```

今回の計算例)

分子種	ペプチド
入力ファイル形式	PDBx/mmCIF
力場 DB ファイル	C99_aa. tpl
入力座標ファイル	2bfi. cif
出力座標ファイル	2bfi_out. pdb
出力トポロジーファイル	2bfi_out. tpl

オプションの意味)

-ipdbx <入力座標ファイル> : 指定した PDBx/mmCIF 形式の座標ファイルを読み込みます。

-opdb <出力座標ファイル> : PDB 形式の座標ファイルを出力します。  
なお、省略した場合、xxx\_tpl.pdb (xxx は入力座標ファイルの名称(拡張子除く)となります。)が出力されます。

-otpl <出力 tpl ファイル> : tpl ファイルを出力します。  
なお、省略した場合、xxx. tpl (xxx は入力座標ファイルの名称(拡張子除く)となります。)が出力されます。

-db <力場 DB タイプ> : 指定したタイプの力場 DB ファイルを読み込みます。  
なお、省略した場合、C99\_aa. tpl を読み込みます。

②以上により計算を開始します。正常終了した場合には以下のメッセージが出力されます。

```
%% Program is done. %%  
%% This program ended normally. %%
```