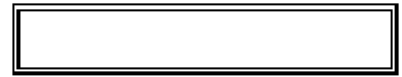


myPresto/tplgnen,tplgeneL 方式設計書

第 4 版

- ・ tplgene 方式設計書
 - ・ tplgeneL 方式設計書
 - ・ トポロジーファイルの情報
-



myPresto/tplgene 方式設計書
(Topology Generator 編)
第 4 版

Copyright (C) 2006-2008 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
Copyright (C) 2006-2008 Japan Biological Informatics Consortium (JBIC)

目次 -

1. はじめに	- 3
2. トポロジージェネレータデータベースの概要	- 4
2.1 目的	- 4
2.2 システム概要	- 5
2.3 トポロジージェネレータの作成範囲	- 6
2.4 用語の説明	- 7

1. はじめに

本設計書では、分子力場パラメータ割り当てソフトウェア(tplgene)の方式について説明する。
また、本ソフトウェアの背景と目的、開発の内容を以下に示す。

概要

平成 12 年度以来、高分子のトポロジ-を、個々のアミノ酸モノマーおよびヌクレオチドのトポロジ-の辞書データベースをもとに作成し、加えて古典力学による分子動力学計算を行うための力場の設定を行ってきた。また、平成 13 年度上期には、トポロジ-作成部を関数化し新規機能を付加することを容易にする改良も行った。平成 13 年度下期には低分子用のパラメータを作成する機能を作成している。しかし、トポロジ-を作成する機能に必須の辞書データベースを作成する機能は存在せず、新規の力場データベースが発表されても本辞書データベースに容易にしかも、矛盾やミスが発生しないで取り込む機能も現状もっていない。また、世界のメジャーな力場は日進月歩で研究が進み、本ソフトウェアも利用している AMBER 力場などは、'99 年に parm99 を発表し、また 2002 年には新規の力場を発表する予定である。このように辞書データベースの作成は急務である。そこで今回は、AMBER parm99 パラメータをもとにしたプロトタイプ DB 作成並びに、既に使用している高分子トポロジ-ジェネレータ用 C96 データベースを用いて検証ツールの作成を行う。

また低分子については、低分子の官能基等をそれぞれ、低分子のフラグメントとみなし、そのフラグメントを認識する。このようにして出来たフラグメントを格納するフラグメント DB の開発も行う。また、Amber が発表した低分子用のパラメータ gaff にも対応する。

開発の内容

高分子トポロジ-ジェネレータ

- ・ AMBER parm99 パラメータをもとにしたプロトタイプ DB 作成
- ・ 高分子トポロジ-ジェネレータ用 C96 データベースを用いて検証ツールの作成

低分子トポロジ-ジェネレータ

- ・ 低分子の官能基等を低分子のフラグメントとみなし、そのフラグメントを認識する
- ・ 上記フラグメントを DB に格納したフラグメント DB の作成
- ・ Amber の低分子用パラメータ群 gaff 対応

以上を平成 14 年度上期、下期を通して行った。

2. トポロジージェネレータデータベースの概要

2.1 目的

平成 12 年度より、統計物理学的に厳密な高効率の構造探索を行うアルゴリズムに基づく構造探索エンジンの入力のために、高分子の原子のつながり情報並びにそのつながり情報にポテンシャルパラメータを割り付けるトポロジージェネレータの開発を行ってきた。また、平成 13 年度上期には、トポロジージェネレータ作成部を関数化し新規機能を付加することを容易にする改良も行った。平成 13 年度下期には低分子用のパラメータを作成する機能を作成している。トポロジージェネレータは高分子のトポロジージェネレータを作成する際に、各分子に関して辞書データベースを使用している。この辞書データベースをトポロジージェネレータデータベースといい、高分子のトポロジージェネレータを作成するときに、各分子に正確にトポロジージェネレータデータベースを割り振ることを実現している。しかし、トポロジージェネレータを作成する機能に必須のトポロジージェネレータデータベースを作成する機能は存在せず、新規の力場データベースが発表されても本プロジェクトに容易にしかも、矛盾やミスが発生しないで取り込む機能も現状もっていない。また、世界のメジャーな力場は日進月歩で研究が進み、本ソフトウェアも利用している AMBER 力場などは、'99 年に parm99 を発表し、また 2002 年には新規の力場を発表する予定である。このように辞書データベースの作成は急務である。そこで今回は、AMBER parm99 パラメータをもとにしたプロトタイプ DB 作成を行い、次回以降正式なトポロジージェネレータデータベースが作成できるように仕組みを検討すると共に、既に使用している高分子トポロジージェネレータ用 C96 データベースを用いて作成されたトポロジージェネレータデータベースが矛盾無く、ミスも無く作成されているかを検証するツールの作成を行う。

以上に付け加えて、低分子については、低分子の官能基等をそれぞれ、低分子のフラグメントとみなし、そのフラグメントを認識することを可能とする。このようにして出来たフラグメントを格納するフラグメント DB の開発も行う。このまた、Amber が発表した低分子用のパラメータ群 gaff にも対応する。

高分子トポロジージェネレータ

AMBER parm99 パラメータをもとにしたプロトタイプ DB 作成

高分子トポロジージェネレータ用 C96 データベースを用いて検証ツールの作成

低分子トポロジージェネレータ

低分子の官能基等を低分子のフラグメントとみなし、そのフラグメントを認識する

上記フラグメントを DB に格納したフラグメント DB の作成

Amber の低分子用パラメータ群 gaff 対応

2.2 システム概要

トポロジージェネレータは入力座標、ポテンシャルパラメータから、分子の結合情報・相互作用の情報からなるトポロジファイルを作成するシステムである。

このトポロジージェネレータは分子の構造についてトポロジを作成するが、そのトポロジ生成の際に辞書データベースともいえるトポロジデータベースを使用している。

また、辞書データベースは進歩発展を続けている。その進歩発展に対応すべく、今回はトポロジデータベースのプロトタイプを作成すると共に、そのトポロジデータベースの検証を行うツールの作成を行うものとする。

システム開発にあたっては以下のことを常に念頭におく。

- ・プログラムのスタイルはオープンなものを用いる。言語はCおよびperlとする。
- ・変数はできるだけ整理して拡張に備えるものとする。
- ・トポロジージェネレータの出力はmyPrestoに準拠する。

以上のことを念頭におき下記のプログラムを作成する。

高分子トポロジージェネレータ

AMBER parm99 パラメータをもとにしたプロトタイプ DB 作成

高分子トポロジージェネレータ用 C96 データベースを用いて検証ツールの作成

低分子トポロジージェネレータ

低分子の官能基等を低分子のフラグメントとみなし、そのフラグメントを認識する

上記フラグメントを DB に格納したフラグメント DB の作成

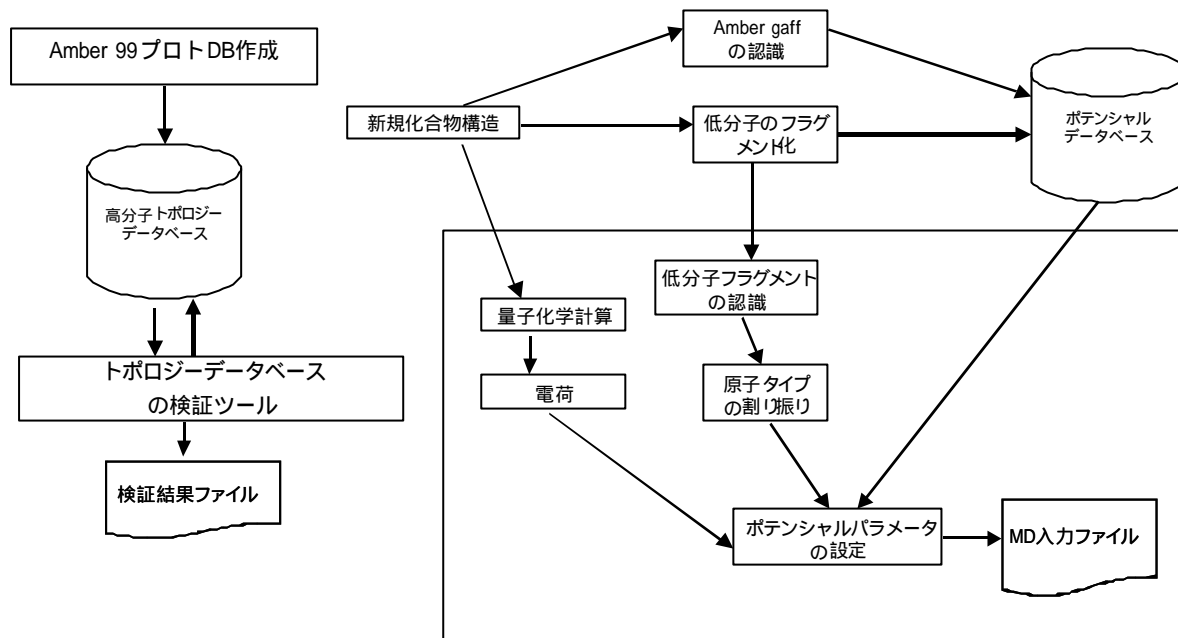
Amber の低分子用パラメータ群 gaff 対応

2.3 トポロジージェネレータの作成範囲

平成14年度作業

高分子トポロジージェネレータ

低分子トポロジージェネレータ



2.4 用語の説明

分子内 SS の関数化

システイン側鎖同士が酸化して共有結合を形成し、分子内 SS 結合を形成し、シスチンとなった場合にも対応する。この情報は、PDB format に含まれている SSBOND 行の情報を利用する。PDB format で同じ鎖内の SS 結合はその部分で共有結合があるようにポテンシャルパラメータも割り付ける。また、平成 12 年度はこの機能はトポロジー作成部の一部としていたが、他の機能を追加しやすいように関数化を行う。

環状のペプチドの関数化

PDB format に環状ペプチドの指定がされると環状分子のトポロジーを作成する。環状ペプチドについても分子内 SS の関数化と同様に取り扱えるようにする。

分子間 SS の関数化

PDB の異なる鎖のシステイン側鎖同士が酸化して共有結合を形成し、分子間 SS 結合を形成し、シスチンとなった場合にも対応する。この情報は、PDB format に含まれている SSBOND 行の情報を利用する。このときは PDB 上で異なる鎖であっても同じ鎖内と認識しなおし、原子の通し番号等を割り付けなおす。分子間 SS についても分子内 SS の関数化と同様に取り扱えるようにする。

リガンド等低分子トポロジー作成

PDB format の他に、与えられた原子の座標 (MOL FILE) と結合情報より結合角情報、二面角情報等の情報ファイルと生成し、各分子のトポロジー情報を作成する。

低分子ポテンシャルパラメータ設定

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関数は本プロジェクトで作成されたものを基本とする。

MD 入力ファイル

上記で作成したトポロジー情報、座標情報、ポテンシャル情報を出力するファイルの作成をする。

ポテンシャルデータベース

各原子タイプによる結合、結合角、二面角、improper torsion 等のポテンシャルパラメータを記述しているデータベース

トポロジーデータベース

各原子タイプによる結合、結合角、二面角、improper torsion 等のポテンシャルパラメータを各分子のトポロジーについて割り振り記述した辞書データベース

myPresto/tplgeneL 方式設計書

(Topology Generator 編)

第 4 版

Copyright (C) 2006-2008 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
Copyright (C) 2006-2008 Japan Biological Informatics Consortium (JBIC)

目次 -

1. はじめに	- 3
2. トポロジージェネレータの概要	- 5
2.1 目的	- 5
2.2 システム概要	- 7
2.3 トポロジージェネレータの開発範囲	- 8
2.4 用語の説明	- 12

1. はじめに

本設計書では、分子力場パラメータ割り当てソフトウェア(tplgeneL)の方式について説明する。
以下に本ソフトウェアの概要及び開発の内容を以下に示す。

概要

分子動力学計算を行う場合には、計算対象分子のトポロジー情報とパラメータ情報が必須となる。これらのトポロジー情報及びパラメータ情報を効率的に作成することができる、トポロジージェネレータの開発を行っている。トポロジージェネレータは、タンパク質、核酸のトポロジーを作成する高分子トポロジージェネレータ(tplgene)と、タンパク質リガンドのトポロジーを作成する低分子トポロジージェネレータ(tplgeneL)について開発を行っている。

平成 15 年度までの成果として、tplgene、tplgeneL の機能はほぼ揃いつつあるが、平成 16 年度に一般公開が予定されている tplgeneL については、さらに拡張性の強化を行っていく必要がある。また、トポロジージェネレータで使用している力場を作成している AMBER グループから、不足パラメータの動的補填方法が提唱されており、トポロジージェネレータにも動的補填機能に対応していく必要がある。そこで、平成 16 年度にはトポロジージェネレータの可読性の向上検討及び機能追加検討を行う。

また、tplgeneL には、AMBER parm99、AMBER 7 General Amber Force Field(AMBER7 gaff)の 2 種類の力場に対応しているが、現在では、AMBER グループから最新の力場である AMBER8 gaff が発表されており、この力場についての早急な対応が必要となっている。そこで平成 16 年度には、この新しい AMBER8 gaff への対応及びパラメータの検証作業を行う。

また、myPresto 関連のツールとして、量子化学計算結果を用いて、tplgeneL 用入力ファイルを生成するツールの開発を行った。平成 16 年度には、ツール群の機能追加検討及び新規ツールの開発を行う。

開発の内容

tplgeneL

プログラムの可読性向上検討

不足パラメータの動的補填関数の作成

AMBER 8 General Amber Force Field(AMBER 8 GAFF)パラメータの対応

ツール群の作成

tplgeneL 用入力ファイル作成ツールの改良

動作環境

本プロジェクトでの開発成果物は、以下の環境で動作するものとする。

SGI O2 Desktop Workstation、及び、Origin300 (OS : IRIX6.5)

Compac AlphaStation ES40、及び、ES45 (OS : Linux)

Sun Fire (OS : Solaris8)

2. トポロジージェネレータの概要

2.1 目的

分子動力学計算システムのプレ処理システムとして、トポロジージェネレータの開発、及び、分子動力学計算システムの周辺ツールの開発を行っている。トポロジージェネレータではタンパク質、核酸のトポロジー、及び、タンパク質のリガンド等の低分子のトポロジーを作成するとともに分子動力学計算を行うための力場の設定を行っている。

平成 12 年度以来、高分子のトポロジージェネレータに関して、トポロジーの辞書データベースに基づく、分子動力学計算を行うための力場の設定を行ってきた。平成 13 年度には、tplgene のトポロジー作成部を関数化し、新規機能を付加する事を容易にする改良を行った。

平成 14 年度以来、tplgeneL に関して、AMBER parm99、及び、AMBER ver.7 General Amber Force Field (AMBER7 gaff) パラメータをもとにして分子動力学計算を行うための力場の設定を行うとともに、低分子の官能基等をフラグメントとみなし、そのフラグメントを格納するためのフラグメント DB の開発等を行ってきた。平成 15 年度には、力場パラメータの変更、追加、バージョンアップに伴う修正を簡単に行う為に、力場情報、パラメータ情報の外部ファイルに変更し、その外部ファイル情報に従ってトポロジーの作成できるような改良を行った。

このように、機能面では、高分子、低分子のトポロジーを作成する為の基本的環境は得られているが、これらのプログラム群を一般公開するには、更なる拡張性を考えたプログラム作成が必要である。そこで、平成 16 年度には、プログラムソースの可読性向上及びデータ構造の整理を行う。

また、世界のメジャーな力場は日進月歩で研究が進み、本プロジェクトも利用している AMBER 力場などは、1999 年に AMBER parm99 (AMBER ver.7) を発表し、現在では AMBER8 gaff が発表されており、この AMBER8 gaff の対応が急務となっている。そこで、平成 16 年度には、AMBER8 gaff パラメータに基づいた、力場情報、パラメータ情報の作成、パラメータの検証作業を行う。

また、新規力場には必ずしも全てのパラメータが準備されている訳ではなく、不足パラメータの補填方法が問題となっている。平成 15 年度までの成果として、tplgeneL に、パラメータが準備されていない場合に使用するデフォルトパラメータの導入を行った。しかしながら、AMBER グループでは不足パラメータの補填方法を提唱しており、その補填方法を導入する必要がある。そこで、平成 16 年度には、不足パラメータの動的補填関数を作成する。

また、平成 14 年度までに作成した tplgeneL は、量子化学計算プログラム GAUSSIAN, GAMESS の出力からの計算に対応しているが、これらの計算手法は計算時間が長くなるために、平成 15 年度には、量子化学計算プログラムに依存しないフォーマットとして、mol2 ファイルフォーマットの対応を行った。

また、精密な計算を行う場合には、上記、量子化学計算結果を用いるが、精密な計算が必要ではない場合には、分子座標情報及び Gasteiger 電荷のみからトポロジーを作成することが望ましい。そこで、平成 16 年度には、分子座標情報から、トポロジージェネレータ用の入力ファイルを生成するツールを作成する。

tplgeneL

プログラムの可読性向上検討

不足パラメータの動的補填関数の作成

AMBER 8 General Amber Force Field(AMBER 8 GAFF)パラメータの対応

ツール群の作成

tplgeneL 用入力ファイル作成ツールの改良

2.2 システム概要

トポロジージェネレータは分子内の原子間の結合情報およびポテンシャルパラメータから、分子の結合情報・相互作用の情報からなるトポロジーファイルを生成するシステムである。

このトポロジージェネレータは分子の構造についてトポロジーを生成するが、そのトポロジー生成の際に辞書データベースともいえるトポロジーデータベースを使用している。

システム開発にあたっては以下のことを常に念頭におく。

- ・プログラムのスタイルはオープンなものとしてC言語を用いる。
- ・変数はできるだけ整理して拡張に備えるものをする。
- ・トポロジージェネレータの出力はmyPrestoに準拠する。
- ・分子の種類に依存する部分を局所化し、プログラムの独立性を高め、未定義分子に対する拡張が容易にできる仕組みが組み込まれている。

以上のことを念頭におき下記のプログラム等を作成する。

tplgeneL

プログラムの可読性向上検討

不足パラメータの動的補填関数の作成

AMBER 8 General Amber Force Field(AMBER 8 GAFF)パラメータの対応

ツール群の作成

tplgeneL 用入力ファイル作成ツールの改良

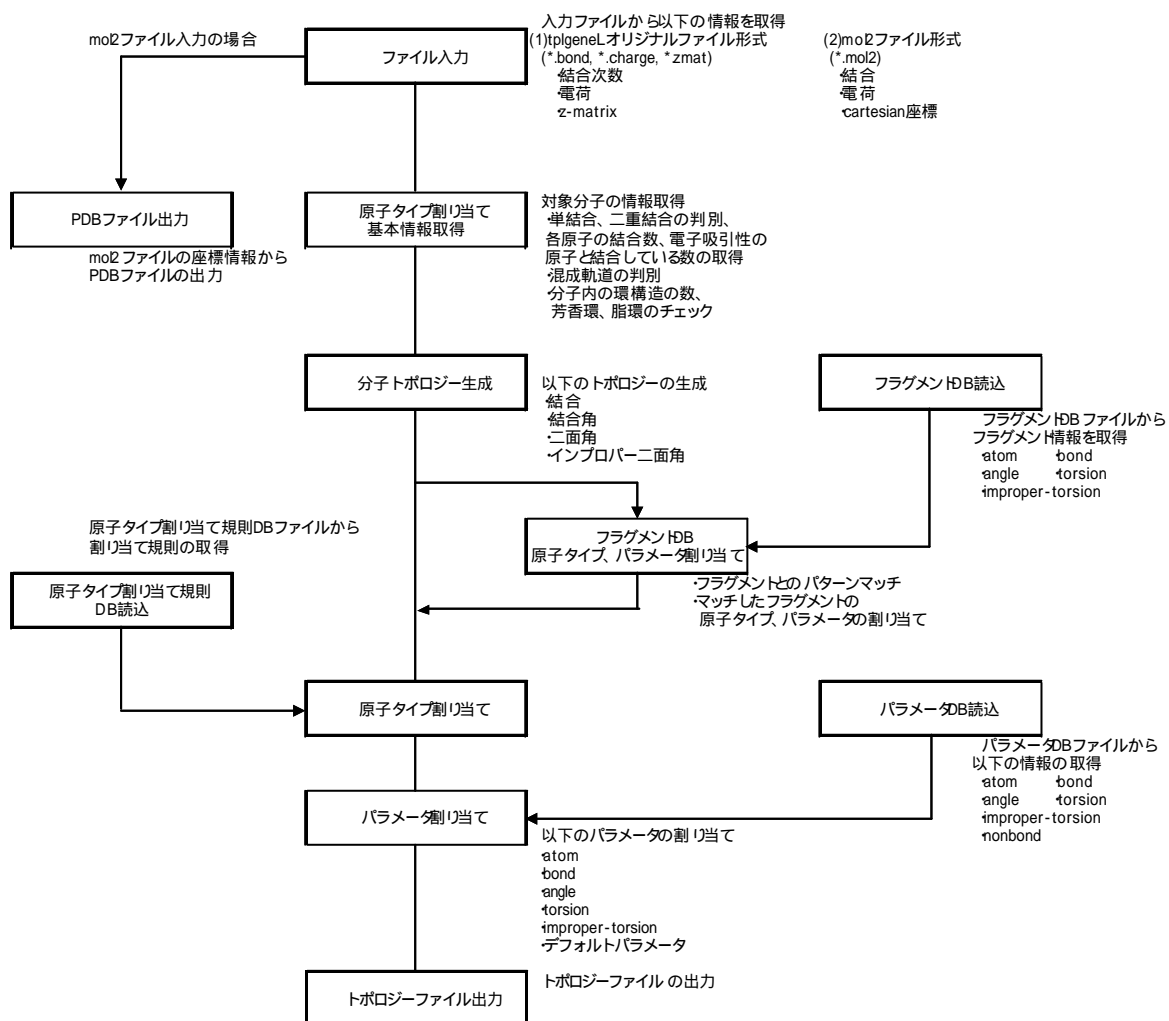
2.3 トポロジージェネレータの開発範囲

平成 16 年度作業範囲

tplgeneL

可読性向上検討

tplgeneL に関しては下図の 、 、 に関して関数の改良を行う。また、 のパラメータ割り当て部に関して、不足パラメータの動的補填機能の追加を行う。



不足パラメータの動的補填関数

結合及び結合角に関して、不足パラメータ(力の定数)の動的補填関数の作成を行う。

・結合パラメータの補填について

結合に関するパラメータの補填は以下の式を用いて計算を行う。

$$K_r = K_{ij} \left(\frac{1}{r_{ij}} \right)^m \quad (1)$$

ここで m は 4.5 を使用する。 r_{ij} は入力構造から得られる結合長の値を、 K_{ij} は以下表 1 に示す各原子の組に対応する値を使用する。

・結合角パラメータの補填について

結合角に関するパラメータの補填は以下の式を用いて計算を行う。

$$K_{ijk}^0 = 143.9Z_i C_j Z_k (r_{ij}^{eq} + r_{jk}^{eq})^{-1} (q_{ijk}^{eq})^{-1/2} \exp(-2D) \quad (2)$$

$$D = \frac{(r_{ij}^{eq} - r_{jk}^{eq})^2}{(r_{ij}^{eq} + r_{jk}^{eq})^2} \quad (3)$$

ここで、 r_{ij}^{eq} 、 r_{jk}^{eq} は入力構造から得られる結合長の値を使用する。 q_{ijk}^{eq} は入力構造から得られる結合角の値を使用する。 C 及び Z は以下表 2 に示す対応する値を使用する。

参考論文

Wang et al. J Comput Chem 2004, 25, 1157

なおこの論文での式(上では式(2))は-2乗と-1/2乗を間違っている。

表 1 . 結合伸縮に関する力の定数を見積もる為のパラメータ一覧

No.	i	j	$\ln K_{ij}$	No.	i	j	$\ln K_{ij}$
1	H	H	4.661	27	C	S	8.117
2	C	C	7.643	28	N	O	7.526
3	N	N	7.634	29	N	F	7.475
4	O	O	7.561	30	N	Cl	8.266
5	F	F	7.358	31	N	Br	8.593
6	Cl	Cl	8.648	32	N	I	8.963
7	Br	Br	9.012	33	N	P	8.212
8	I	I	9.511	34	N	S	8.073
9	P	P	8.805	35	O	F	7.375
10	S	S	8.316	36	O	Cl	8.097
11	H	C	6.217	37	O	Br	8.276
12	H	N	6.057	38	O	I	8.854
13	H	O	5.794	39	O	P	7.957
14	H	F	5.6	40	O	S	7.922
15	H	Cl	6.937	41	F	Cl	7.947
16	H	Br	7.301	42	Cl	I	9.309
17	H	I	7.802	43	Br	I	9.38
18	H	P	7.257	44	F	P	7.592
19	H	S	7.018	45	F	S	7.733
20	C	N	7.504	46	Cl	P	8.656
21	C	O	7.347	47	Cl	S	8.619
22	C	F	7.227	48	Br	P	8.729
23	C	Cl	8.241	49	Br	S	8.728
24	C	Br	8.478	50	I	P	9.058
25	C	I	8.859	51	I	S	9.161
26	C	P	8.237	52	P	S	8.465

表 2 . 結合角の bend に関する力の定数を見積もる為のパラメータ一覧

Element	C	Z
H	-	0.784
C	1.339	1.183
N	1.300	1.212
O	1.249	1.219
F	-	1.166
Cl	-	1.272
Br	-	1.378
I	-	1.398
P	0.906	1.620
S	1.448	1.280

ツール群の作成

tplgeneL 用入力ファイル作成ツールの改良

tplgeneL 用入力ファイル作成ツールの改良を行う。開発成果物は、座標情報、または、座標情報と分子内総電荷情報を元に、tplgeneL 用の入力ファイルを作成する機能を有するものとする。

2.4 用語の説明

環状のペプチドの関数化

PDB format に環状ペプチドの指定がされると環状分子のトポロジーを作成する。環状ペプチドについても分子内 SS の関数化と同様に取り扱えるようにする。

リガンド等低分子トポロジー作成

PDB format の他に、与えられた原子の座標と結合情報より結合角情報、二面角情報等の情報ファイルと生成し、各分子のトポロジー情報を作成する。

低分子ポテンシャルパラメータ設定

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関数は本プロジェクトで作成されたものを基本とする。

MD 入力ファイル

上記で作成したトポロジー情報、座標情報、ポテンシャル情報が記述されたファイル。

ポテンシャルデータベース

各原子タイプによる結合、結合角、二面角、improper torsion 等のポテンシャルパラメータを記述しているデータベース

トポロジーデータベース

各原子タイプによる結合、結合角、二面角、improper torsion 等のポテンシャルパラメータを各分子のトポロジーについて割り振り記述した辞書データベース

フラグメントデータベース

低分子のトポロジーを発生させるのに、現在は parm99、及び、gaff 力場を使用しているが、原子タイプの欠損や、力場パラメータの不足があった場合には、計算分子のトポロジーを出力できない場合がある。このような場合に、その構成部分（一般的には官能基等）の構成とパラメータをデータベースに登録することにより、トポロジーの出力が可能となる。この登録するためのデータベースをフラグメントデータベースと呼ぶ。

AMBER

Assisted Model Building with Energy Refinement の略。生体分子動力学のシミュレーションを行うための複数のプログラムからなるソフトウェアパッケージ。用途で大別して入力準備プログラム、シミュレーションプログラム、結果解析プログラムから構成される。

剛体モデル

多原子分子では分子内振動や、2 面角の回転を考慮しなければいけないが、目的によってはこれらの運動を凍結して分子全体を剛体として扱うこともできる。剛体の分子動力学法はこのように、分子内自由度を凍結した分子の運動を解析するのに用いる。

レセプター

受容体のこと。通常、色々な生体物質、薬品、あるいは物理的的刺激などによる細胞外からの信号を認識し、細胞に応答を行き起こす為の構造のこと。主にタンパク質と糖鎖からなる。

リガンド

酵素に結合する基質、補酵素、調整因子のようにタンパク質と特異的に結合する物質のこと。

Resp 電荷

量子化学計算結果の静電ポテンシャルを再現するように各原子にフィッティングした電荷。計算時、等価な原子に同じ数値を割り当てるなど拘束を設けることもできる。

Gasteiger 電荷

分子内の各原子の電気陰性度に基づいた計算された電荷の一つ。各原子同士の直接の結合のみに基づいて計算されている。

Mulliken 電荷

分子上の電子分布を各原子上に割り当てた場合の原子の電荷のこと。一般の量子化学計算により得られる。

myPresto/tplgene 方式設計書
(トポロジーファイルの情報編)
第4版

Copyright (C) 2006-2008 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
Copyright (C) 2006-2008 Japan Biological Informatics Consortium (JBIC)

・トポロジーファイルの情報

構成原子
共有結合
共有結合角
内部回転角
インプロパー内部回転角
非共有結合相互作用

a) 共通の書式

- 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 ';' マーク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 ' ' または 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。
このマーク以降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、
ライブラリー
(データベース) を利用する場合には、ライブラリー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)

< 註 >

大文字部分は、省略できる部分を表す。

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-7) ~ 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 A 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    3    4    5    6    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 ->; 3
      -2    -1     0     0     0.957   104.500    0.000

```

c-4) 共有結合情報

共有結合を形成する原子の絶対番号 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 K_{aijk} : kcal/(mol*radian*radian)
 共有結合の平衡結合長 a_{0ijk} : degree
 $E_{angl}(i, j, k) = K_{aijk} * ((a_{ijk} - a_{0ijk})^2)$
 $E_{angl}(i, j)$: 共有結合角エネルギー
 a_{ijk} : i, j, k がなす角度

```

TPL> ANGLES
ALA-DIMER-1          ; <--- 分子名
; NUMBER OF ANGLES =    39
   2      1      3      35.000000      109.500000 ;      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      4      35.000000      109.500000 ;      2
   2      1      5      35.000000      109.500000 ;      3

```

3	1	4	35.000000	109.500000	4
3	1	5	35.000000	109.500000	5
4	1	5	35.000000	109.500000	6
1	5	6	35.000000	109.500000	7
1	5	7	80.000000	111.200000	8
1	5	11	80.000000	111.200000	9
6	5	7	35.000000	109.500000	10
6	5	11	35.000000	109.500000	11
7	5	11	63.000000	111.100000	12
5	7	8	35.000000	109.500000	13
5	7	9	35.000000	109.500000	14
5	7	10	35.000000	109.500000	15
8	7	9	35.000000	109.500000	16
8	7	10	35.000000	109.500000	17
9	7	10	35.000000	109.500000	18
5	11	12	80.000000	120.400000	19
5	11	13	70.000000	116.600000	20
12	11	13	80.000000	122.900000	21
11	13	14	35.000000	119.800000	22
11	13	15	50.000000	121.900000	23
14	13	15	38.000000	118.400000	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 K_{ijkl} : kcal/mol
同一の共有結合の周りにおける内部回転角の総数 N_{ijkl}
 2π を単位とした回転対称の数 N_{sijkl}
位相 T_{ijkl}
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。
 $E_{tors}(i, j, k, l) = (K_{ijkl} / N_{ijkl}) * \cos((N_{sijkl} * T_{ijkl}) + T_{ijkl})$
 $E_{tors}(i, j, k, l)$: 内部回転角エネルギー
 T_{ijkl} : 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)
; 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)の周りにある内部回
      転角の総数
; Ntijkl は 9 ケである。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

```
Evdw(i,j) = RVij * ( ( Aij / rij**12 ) - ( Bij / rij**6 ) )
Evdw(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))
```

