Facioによる分子モデルの作成



九州大学理学研究院 化学部門 末永正彦

分子モデリングの流れ



分子モデルの変更(1)



(関係する二つの原子をクリック)

分子モデルの変更(2)

<u>E</u> dit	<u>M</u> odels	Preference:		M <u>i</u> scellaneous	<u>U</u> tilities	<u>C</u> alcul				
<u>U</u> no	do									
<u>A</u> to <u>B</u> or	nm nd		}							
<u>G</u> ro	<u>G</u> roup ▶			Move Group Along Bond						
<u>R</u> eplace H with Align Four Atoms		i th toms	Þ	M <u>o</u> ve Group with Angle Change <u>R</u> otate Group Around Bond						
<u>M</u> or <u>E</u> na	dify able Safet;	y Mode	ſ							
Ope	en Edit To	ol Box								





結合に沿ったグループの移動









結合角の変化に合わせたグループの移動





結合の周りでのグループの回転

分子モデルの変更(3)

<u>E</u> dit	<u>M</u> odels	<u>P</u> referen	ces	M <u>i</u> scellane
<u>U</u> n	do			
<u>A</u> to	om	I		
<u>B</u> or	nd	I		
<u>G</u> ro	oup	I		
<u>R</u> ej	place H w	ith I		<u>с</u> нз
Alio	gn Four Af	toms		C(sp2)H2
<u>M</u> o	dify	I		C(sp)H
<u>E</u> na	able Safety	y Mode		P <u>h</u> enyl
Op	en Edit To	ol Box		<u>G</u> lycosyl OH
				<u>F</u> ormyl
				<u>N</u> H2



Glycosylの導入は、 α、βおよび 糖の種類をまず選ぶ。

置換基を選び、 <mark>水素原子を</mark>クリックすると、 置換基が導入される。



 α -D-Glucose



Trehalose

モデリングの為のその他の機能(1)



下の2つの操作は視点を変えているだけなので、座標は変化しない。

SHIFTキー + 画面のドラッグ=モニター平面の中心を通る法線の周りの回転 ALTキー + 画面のドラッグ=モニター平面内での移動

モデリングの為のその他の機能(2)



<u>U</u> tilities	<u>C</u> alculations	<u>T</u> ools	FM <u>O</u>	<u>A</u> bout	
<u>D</u> ump <u>G</u> eome Spin Al	tric Comparisor pout	1	+ + +		近傍
Interato Bond A Di <u>h</u> edra	omic Distance Ingle al Angle				1
<u>A</u> djust <u>M</u> ove V <u>V</u> iew	Position and Ti Whole Molecule	ilting An	gles ►		
<u>F</u> orced	Move		Þ	<u>T</u> oXYPlane (si∉	(ma-h ⁱ plane)
<u>C</u> omple	ete		Þ	To_XZ Plane (si∉ To <u>Y</u> Z Plane (si∉	gma−v plane) gma−v 'plane)
<u>R</u> eassi Fi <u>n</u> d Tl	gn Atom Numbe ER Record in P	ers DB		To <u>Z</u> Axis (princ To Y= <u>X</u> Plane	ipal rotation axis)
Find C	losely Located	Atoms			

近傍にある原子をXY平面($\sigma_{
m h}$)に強制移動

近傍は、Facio.iniの [Utilities]セクションの ApproximityCriteria で定義。

GAMESSのSymmetry uniqueな モデルの作成に必要な機能

モデリングの為のその他の機能(3)









4つの原子が一直線に並ぶ

モデリングの為のその他の機能(4)

<u>U</u> tilities	<u>C</u> alculations	<u>T</u> ools	FM <u>O</u>	<u>A</u> bout	
<u>D</u> ump <u>G</u> eome Spin Al	tric Comparisor pout	1	* * *		
Interato <u>B</u> ond A Di <u>h</u> edra	omic Distance Ingle al Angle				
<u>A</u> djust <u>M</u> ove V <u>V</u> iew <u>F</u> orced	Position and Ti Whole Molecule Move	ilting An	gles + +		
<u>C</u> omple Reacci	ete an Atom Numbe	aro	•	<u>M</u> issing Bonds M <u>i</u> ssing Hydroger	n Atoms
Find Ti Find Cl	ER Record in P losely Located	DB Atoms			



結合角や結合距離をもとにした 水素原子の補完機能

これとは別に、タンパク質と核酸のPDB ファイルのATOMレコードを解析して、 不足している水素原子を見つけ補完する 機能がある。



2つの構造を読み込む機能のモデリングへの応用



構造最適化に関する各計算法の特徴

	長所	短所
TINKER	計算時間が短い 初期構造が多少悪くても 収束しやすい。	力場パラメータの関係で 計算できない官能基が いくつかある。例えば、 カルボン酸
MOPAC	計算時間が短い。 PM6法では、H~Ba, Lu, Hf~Biを含む計算が可能。	最適化構造の信頼性。 TiH ₄ , Re ₂ Cl ₈ , Cyclobutane, Cu ₂ (AcO) ₂ (H ₂ O) ₂
GAMESS Gaussian	ほとんど全ての構造について 計算が可能。 計算法にもよるが、最適化構 造の信頼性が高い。	計算法や分子の大きさによ るが、概して計算時間が長 い。 初期構造が悪いと、結果が 得られないこともある。

外部プログラムを使うための環境設定



TINKERの生体高 分子用の力場パラ メータの指定

各プログラムの 実行ファイルを 指定する。

Browseボタンを 使うとパス名の 間違いが無い。

GAMESSの出力ファイルにある最適化構造を表示する際に、 Symmetry Uniqueな原子のみを表示するか否かを決める。

GAMESSの入力ファイル(1)



3-21G











基底関数の設定





6-31G(d,p)

6-31+G(d)

6-31+G(d,p)

\$BASIS GBASIS N31

\$BASIS

GBASIS

NDFUNC 1 -

N31

NDFUNC 1 -

NPFUNC 1

NPFUNC 0

▼ NGAUSS 6 ▼

NGAUSS 6

NFFUNC 0 -

🔽 DIFFSP 🧮 DIFFS

NFFUNC 0 -

V DIFFSP 🔲 DIFFS

5BASIS ▼ NGAUSS 6 ▼ GBASIS N311 NDFUNC 1 -NFFUNC 0 -NPFUNC 1 -🔽 DIFFSP 🥅 DIFFS 6-311+G(d,p)





6-311+G(2df,2p)

6-311++G(d,p)

N311

GBASIS

NDFUNC 1 -

NPFUNC 1

▼ NGAUSS 6 ▼

NFFUNC 0 -

🔽 DIFFSP 🔽 DIFFS

\$BASIS					
GBASIS N3	11	-	NGA	USS	j 🔽
NDFUNC 2	-	NEFU	JNC	1 🕨	
NPFUNC 2	-	🗸 Dif	FSP	🗖 DI	FFS







GAMESSの入力ファイル(2)

TINKER



反映される。



暫定的な対処法としては、力場パラメータを自作するか パッチファイル(MM3PRM_Patch)をmm3.prmに追加 する。



スクリプト

Gaussian

🕆 Gauss	ian Input – SSH/SFTP Client for Remote Gau	ıssian Job 🔳 🗖 🔀
Link O cor (% comr	nmands %Chk=Azulene nands) %Mem=48MB	Custom Route
Route section (# lines) Title Section Charge	<pre># RHF/6-31G(d) Opt Pop=Reg *** s\MyMoMo\FacioDev\F12d16\PDB\Azulene.pdb *** Multiplicity Save as Gaussian Job File (*.gjf/*.com) 1 Save as *.gjf and Execute the Job</pre>	Save As Reactant Product Initial_TS Close Reset All
- Using C Host: User N	aussian on the remote server through SSH / SFTP con Connect to SSH server hakozaki.cc.kyushu-u.ac.jp ame : d70333a Terminal SSHターミナ)	nection Sian Input and Send It nd Batch Job Script cript : C C C C
	Type shell command in the text box below a	nd click Send button.
	SFTP SETP Selec as a	Dir Rename Delete GetFile PutFile Ifresh Sort Table Select Check File t Formatted Check File
То	change directory, click the directory name.	lities on the server

Gaussianの実行は、 独立プロセスのみ。

	Please edit Facio.ini to define your own Gaussian route sections.
[1] [2]	C #RHF/6-31G(d) Opt Pop=Reg C #B3LYP/6-31G(d)/Auto Opt Pop=Reg
[3]	C # RHF/LANL2DZ Opt
[4]	C #B3LYP/6-311+G(2df,2p)
[5]	C #B3LYP/6-31+G(d, p) Opt Freq
[6]	C # PM3 Opt
[7]	C # MP2/6-31+G(d) SCF=Tight
[8]	C # RHF/6-31G(d) Opt Freq=VCD
[9]	C # RHF/6-31G(d) NMR
[10]	C # RHF/6-31G(d) Opt=(QST2, CalcFC) Pop=Reg
[11]	C # RHF/6-31G(d) Opt=(TS, CalcAll, NoEigenTest) Pop=Reg
[12]	O # RHF/6-31G(d) IRC=(CalcAll, MaxPoints=12, StepSize=10) NoSym
[13]	Ø # MP2/6-31G(d) Pop=NPA Density=MP2
[14]	O # TD=(NStates=6, 50-50) B3LYP/6-31G(d)/Auto
[15]	O # RCIS(NStates=5)/6-31+G(d) Density=All
[16]	C #ZINDO
[17]	C # SAC-CI=(Full, Singlet=(NState=4), LevelOne)/6-31G(d)
[18]	C #B3LYP/6-31+G(d) SCRF=(PCM, Solvent=CH3CN) SCF=Tight
[19]	C #B3LYP/6-31+G(d) SCRF=(IPCM, Solvent=H2O) SCF=Tight
[20]	# B3LYP/6-31+G(d) SCRF=(SCIPCM, Solvent=C6H6) SCF=Tight C # B 1 Control (C) SCRF=(SCIPCM, Solvent=C6H6) SCF=Tight
[21]	C # Opt ONIOM(HF:UFF)
[22]	O # CBS-4M
[23]	
[24]	C # MP4/6-316(0)
[20]	# ME4/0-311++0(0,0) # CASSOF(6,5)(6-21G(d),0)
[20]	C # CIS(6-31+G(d) Ont
[28]	C #
[29]	C #
[30]	C #
Ac	dd " Geom=Check Guess=Read " When Multi-Step Jobs Editor is
<u></u>	open, key words are added there.
	1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-1-

🖶 User-defined Gaussian Route Sections

ルートセクションを 30個登録して使用 することができる。

STQN法におけるReactant, Product, Initial_TSの設定

Qalculations Tools FMQ PC GAMESS MSMS MSMS TINKER-MM3 WinGamess SIMOMM Layers Gaussian Gaussian Gaussian Utilities QNIOM Layers UTChem MOPAC Item Content

Van der Waals Volume

Z-マトリクス表示

Facioの子プロ セスとして実行 すると、計算終 了後、出力ファ イルが自動的に よみこまれ、表 示モデルに反映 される。

MOPAC

	+ MOPAC2009 Input Options											
	Keywords EF VECTORS MMOK CHARGE=0 GNORM=1.0											
Title s\MyMoMo\FacioDev\F12d16\PDB\Azulene.pdb												
	Other Info. MOPAC input generated by Facio 12.1.3											
	Geor	netrv	🔽 Z-Matri	x	Redefine	Co	nnectivity	Custom Keywords				
l							_		_			
I			Х		Y		Z					
	1	3	0.04200	1	0.00000	1	2.12100	1				
	2	С	-1.12800	1	0.00000	1	1.28000	1				
	1	С	-0.72700	1	0.00000	1	-0.04100	1				
	4	С	0.75000	1	0.00000	1	-0.06100	1				
	5	С	1.16400	1	0.00000	1	1.33300	1				
	6	С	-1.59600	1	0.00000	1	-1.16100	1				
	7	С	-1.26000	1	0.00000	1	-2.47400	1				
	8	С	0.02800	1	0.00000	1	-3.07200	1				
	9	С	1.25600	1	0.00000	1	-2.49500	1				
	10	С	1.59700	1	0.00000	1	-1.11800	1				
	11	н	0.01200	1	0.00000	1	3.20900	1				
	12	н	-2.15200	1	0.00000	1	1.64700	1				
	13	н	-2.66700	1	0.00000	1	-0.91000	1				
	14	н	-2.09200	1	0.00000	1	-3.19300	1				
	15	н	0.01100	1	0.00000	1	-4.17200	1				
	16	н	2.11900	1	0.00000	1	-3.17700	1				
	17	н	2.67400	1	0.00000	1	-0.89300	1				
I	18	н	2.20100	1	0.00000	1	1.66000	1				
	Syn C	nmetr Data	y								< >	
	Re	eactio ⊃ath	n 🤇								>	
	Base I	File N	lame : <mark>Azul</mark>	en	e			S	ave A	s MO	PAC Inp	ut
		Rur • A	n MOPAC As Facio's C	hilo	d Process	C	As An Inde	epe	ndent	: Proc	ess	
			E	xec	ute Calculat	ion	Close					

MOPACの実行

	🕀 М	OPAC Custom Keywords 🛛 🔀
	Plea	se edit Facio.ini to define your own custom keywords.
~	[1] [2] [3] [4] [5] [6] [7]	 C EF VECTORS MMOK CHARGE=0 GNORM=1.0 C EF VECTORS MMOK CHARGE=0 ENPART BONDS C LBFGS CHARGE=0 MOZYME C pKa C TS C FORCE LET C IRC=1
	[8] [9]	C UHF C C.I.=2 ROOT=2 SINGLET MECI LARGE VECTORS
	[10] [11]	C EPS=78.4 NSPA=60 EF VECTORS CHARGE=0 GN
	[12] [13] [14]	0
	[15] [16]	о с
	[17] [18]	0
	[19] [20]	0

Keywordsを20個登録し て使用することができる。

構造最適化の途中経過の確認法

WinGamess, PC GAMESSおよびGaussianの構造最適化の出力ファイルのコピーを作る。(Ctlキーを押しながら、ファイルをドラッグする)

出力ファイルのコピーをFacioのメイン画面にDrag&Dropする。







ペプチドと核酸のモデリング

Tools EMO About													
Viewers					🕈 Poly	peptid	e Bu	ilder					×
<u>B</u> uilders Cross Section Controlle	Polyp	eptide Builder				Res	Phi	Psi	Omeg:		1 Lei	ter Co	bde
					1 2	Ala Cve	·57 .57	-47	180	Ala	Cys	Asp	Glu
Load Gaussian		/			3	Phe -	.57 .57	-47	180	Phe	Gly	His	lle
<u>M</u> O Levels Graphical Vie NMB Shielding Tensor	wer				4	Gly	-57	-47	180	Lys	Leu	Met	Asn
					5	Leu	-57	-47	180	Pro	GIn	Arg	Ser
Load Dichem Output	•				<u>б</u> 7	Pro Gin	·57 ·57	-47	180	Thr	Val	Trp	Tyr
					<u> </u>						Hid	Hie	
	4									0	rn Ai	b Po)a
🕆 Polynucleotide Builder	×										Back:	space	
Res Helix Form 1 A ● A ● B ● Z		(基本拼	副作)		L N-Cap F	Residu	es C	-Cap R	esidues		Dc	hiralit	al V
2 G A G C U			×		ACE	FOR		NME N	IH2 ⁻	Ferminat	e	Cyclia	ze
	1.	アミノ酸	愛残基又に	は	 He 	elix A	lpha F	Helix (3.	6/13)	-	1		
Back space Terminate		核酸塩基	い指定。		🔿 Str	and A	ntipar	allel Be	ta 🖵		-		
Euild a Double Helix		一つ戻る	るときは、		🔿 Be	ta Turn	Туре	el 🔽	2nd res	sidue 🔄		Inver	se
using Complementary Base	s	Backsna	ace		Phi	4		•	57 Fo	rce Field	amb	er99.	prm
Force Field Build		Duckopt	acc		Psi	•		•	47		Build		
amber99.prm Minimize Optimize	2	目ない。	•		Omega	4		1	80	Minimize		Optim	rize
Save the result as Tinker xyz file Close		取仮に1	erminat	e	Save th	ne resul	t as T	ïnker xy	z file		Close		
, xyz Onacifutila name hafara Duild Minimizera or Ordin		をクリッ	ノク						.xyz				
Specify file name before Build, Minimize, or Optin		D1.1 2			Specify fi	ile nam	e befo	ore Buil	d, Minimiz	te, or Opt	imize		
	J.	ー Dulla で	フワツク										

分子モデリングの例



変更を加える前に、「別名のPDBで保存」する。







