

MolGraphV の使い方

目次

I. 概要.....	4
I-1. はじめに.....	4
I-2. 基本操作.....	5
II. ファイル.....	6
II-1. 開く.....	6
II-2. 追加読込.....	6
II-3. 閉じる.....	6
II-4. 全て閉じる.....	6
II-5. 座標の全保存.....	7
II-6. 座標の選択保存.....	7
II-7. 画像の保存・コピー.....	7
II-8. 印刷.....	7
II-9. 最近使ったファイル.....	7
II-10. 最近使ったフォルダー.....	7
II-11. 終了.....	7
III. 表示.....	8
III-1. 表示設定.....	8
III-2. 残基毎の表示設定.....	8
III-3. 全画面表示.....	9
III-4. 表示詳細オプションの設定.....	9
III-5. 常時非表示原子の設定.....	9
III-6. 常時非表示原子の設定解除.....	9
III-7. 常時表示原子の設定.....	9
III-8. 常時表示原子の設定解除.....	9
III-9. 単位格子.....	10
III-10. 分子振動.....	10
III-11. 自動回転.....	10
III-12. 画像のサイズと位置.....	10
III-12-1. 画面サイズに合わせる.....	10
III-12-2. 表示部分を画面中央に移動.....	10
III-12-3. 座標原点が画面中央になるように移動.....	10
III-12-4. サイズと位置を直前の状態に戻す.....	10
III-12-5. サイズと位置を初期状態に戻す.....	11
III-13. 座標原点(回転中心)の移動.....	11
III-13-1. 指定する原子の位置を座標原点に設定.....	11
III-13-2. 表示している部分の中心を座標原点に設定.....	11
III-13-3. XY座標原点を画面中心に固定.....	11
III-13-4. 座標原点の位置を初期状態に戻す.....	11
III-13-5. 座標原点に仮想原子を表示.....	11
III-14. 分子配向.....	11
III-14-1. 現在の配向を初期状態として設定.....	11

III-14-2. 分子配向を初期状態に戻す	11
III-15. データファイルの内容	11
IV. 構造	12
IV-1. 距離と角度	12
IV-2. 原子間ベクトルの向き	12
IV-3. ペプチド主鎖のコンフォメーション	12
IV-4. 水素結合のリスト	13
IV-5. アミノ酸配列	13
IV-6. 残基の種類と数	14
IV-7. ペプチド主鎖の詳細な構造	14
IV-8. アミノ酸側鎖の詳細な構造	14
IV-9. 2次構造	15
IV-10. 2次構造の再検出	15
IV-11. PDBファイル中の2次構造	15
V. 編集	16
V-1. 分子名	16
V-2. 原子	16
V-2-1. 追加	16
V-2-2. 水素原子の付加	16
V-2-3. 削除	17
V-2-4. 孤立原子の削除	17
V-2-5. 削除	17
V-2-6. 復元/完全削除	17
V-2-7. 全水素原子の完全削除	17
V-2-8. 属性変更	17
V-2-9. 番号付替	17
V-3. 結合	17
V-3-1. 追加	17
V-3-2. 削除	17
V-3-3. 復元/完全削除	17
V-3-4. 再検出	17
V-3-5. 水素結合の追加	17
V-3-6. 水素結合候補の検出	18
V-3-7. 水素結合の一括削除	18
V-4. 残基	18
V-4-1. 削除	18
V-4-2. 復元	18
V-4-3. 残基名・番号変更	18
V-4-4. 水分子の全削除	18
V-4-5. 番号付替	19
V-5. サブユニット鎖	19
V-5-1. 操作対象鎖の選択	19
V-5-2. 対称操作で複製	19
V-5-3. 削除	19
V-5-4. 復元/完全削除	19
V-5-5. 中心を座標原点に設定	19

V-5-6. 回転と並進.....	19
V-5-7. 異なる鎖の重ね合わせ.....	20
V-5-8. 異なる鎖の繋ぎ合わせ.....	20
V-5-9. 鎖名変更.....	20
V-6. 構造最適化.....	21
VI. ツール.....	22
VI-1. ペプチドの作成.....	22
VI-2. 分子の作成.....	22
VI-3. オプション.....	23
VII. ウィンドウ.....	23

I. 概要

I-1. はじめに

MolGraphV は、タンパク質、核酸などの巨大分子の構造を Protein Data Bank (PDB、<http://www.rcsb.org/pdb/>)に登録されているデータに基づいて描画するためのものです。タンパク質や核酸の構造を編集し、新たな分子や複合体の構造を作成する機能も追加されています。さらに、小分子単独の構造や結晶構造も表示できるように拡張されています。また、量子化学計算プログラム Gaussian などで計算した分子振動の様子を矢印や動画として描画・保存することも可能です。小分から巨大分子にいたる幅広い種類の分子の構造を表示・編集し、分子構造に関する理解を深めるためのツールとして、ご利用ください。

MolGraphV をインストールするためには、**MolGraphV_Install.exe** をダブルクリックしてください。インストールするフォルダー (通常、C:\Program Files\MolGraphV) を指定し、インストールボタンをクリックすれば、インストールされます。

アンインストールする場合は、コントロールパネルの「プログラムと機能 (または、アプリケーションの追加と削除)」で行なって下さい。

インストールしたフォルダーには、少なくとも以下のファイルがあるはずです。

MolGraphV.exe

MolGraphV の実行ファイル (本体)

MolGrLib.dll

MolGraphV 用のダイナミックリンクライブラリー

ReadMe.txt

MolGraphV の概要説明

MolGraphV_Help.pdf

MolGraphV の使い方に関するヘルプ (現在ご覧になっているファイル)

SpaceGrp.dat

結晶構造の表示に必要な空間群に関するデータ

SampleData_Protein.pdb, SampleData_Peptide.pdb, SampleData_DNA.pdb,

SampleData_Crystal.csd, SampleData_Crystal.cif,

SampleData_Molecule.xyz, SampleData_Molecule.zmx,

SampleData_Vibration.nct, SampleData_Vibration.out,

SampleData_AminoSeq.asq

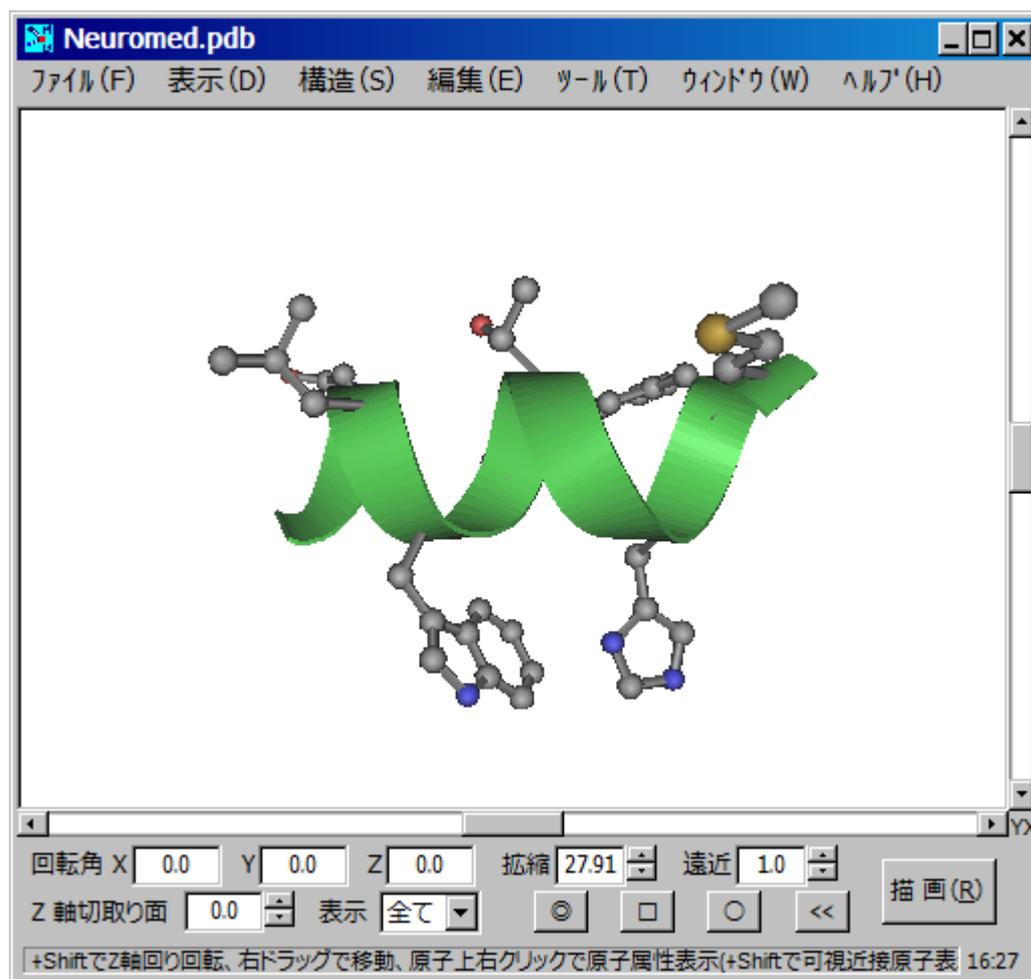
タンパク質・核酸・小分子の構造、分子振動、アミノ酸配列のサンプルデータ

St5unst.log

MolGraphV をアンインストールする際に必要なファイル。絶対に削除や編集をしないでください。

Visuabl Basic 5.0 で作成したプログラムを実行するためには、実行時ライブラリー MSVBVM50.DLL などがが必要です。セットアッププログラムを実行すると、必要なファイルを適切なフォルダーに自動的に書き込みます。

I-2. 基本操作



上の図は、MolGraphV を起動して、生理活性ペプチドであるNeuromedin Bの構造を表示したものです。

回転角は、**X軸** (横軸)、**Y軸** (縦軸)、**Z軸** (画面に垂直な軸)の周りの回転角を示しています。これらの欄に数値を直接入力するか、または、画面横・縦にある**スライダー**を動かすと(横方向はY軸回り、縦方向はX軸回り、Shiftキーを押しながら動かすとZ軸回り)、画像が回転します。**拡縮**、**遠近**は、各々、画像の大きさと遠近感を設定するための入力欄です。**Z軸切り取り面**と**表示**の欄は、ある平面から手前側、または、遠方側だけを表示したい場合に設定します。◎、□、○のボタンは、各々、現在表示している画像の中心を座標原点に設定する、画像のサイズを画面サイズに合わせる、または、画像を画面中央に移動させるためのものです。さらに、<<ボタンは、描画状態を一つ前の状態に戻すためのボタンです。また、**マウスの左ボタン**をドラッグして範囲指定してから、描画ボタンを押すと範囲指定した部分が拡大表示されます。画像を左右に移動したい場合は、**マウスの右ボタン**を押してドラッグしてください。画像の拡縮は、**マウスのホイール**を回転させてもできます。その他の操作も含めた説明は、最下欄の**ステータスバー**に表示されますので参考にしてください。

II. ファイル

II-1. 開く

以下の形式のデータを読み込むことができます。

1. タンパク質・核酸構造データ (ファイル拡張子 .pdb, .ent)

PDB (Protein Data Bank, <http://www.rcsb.org/pdb/>) からダウンロードできる構造データ、または、それに MolGraphV での表示オプションなどを付加して保存したデータ

2. アミノ酸配列データ (ファイル拡張子 .asq)

MolGraphV の「オプション」-「ペプチドの作成」で作成したアミノ酸配列データ

3. 結晶構造データ (ファイル拡張子 .csd, .cif)

小分子の結晶構造データ。Cambridge Structural Database System (<http://www.ccdc.cam.ac.uk/>) や Crystallography Open Database (<http://www.crystallography.net/>) などから、ダウンロードできます。

4. NCTB振動計算結果 (ファイル拡張子 .nct)

経験的な基準振動計算プログラムNCTBによるの分子振動計算結果

5. Gaussian振動計算結果 (ファイル拡張子 .out)

量子化学計算プログラムGaussianによるの分子振動計算結果

6. 分子構造XYZ座標データ (ファイル拡張子 .xyz)

分子の構造を、原子名とX、Y、Z座標値を一行毎に並べた座標データ

7. 分子構造Z-行列データ (ファイル拡張子 .zmx)

分子の構造をZ-行列 (参考: <https://sites.google.com/site/jonoonweb/tips/zmat>) で表わしたデータ

「オプション」の「ファイルの関連付け」で、各拡張子を MolGraphV に関連付けておくと、ファイル名をダブルクリックするだけで、MolGraphV が自動的に起動し、そのデータファイルを読み込みます。

エクスプローラで目的のファイルを右クリックし、送るメニューで、MolGraphV に送ると、そのデータファイルを読み込みます。

II-2. 追加読込

現在表示されている分子に追加する分子のデータを読み込みます。読み込めるデータの形式は、「開く」場合と同じです。複数の分子を読み込んで、分子複合体などを作成する場合や、複数の分子を重ねあわせ、構造の相違する箇所を特定する場合などに、この読込み方式を使用します。また、複数の MolGraphV を起動し、各々異なるウインドウに表示する場合にも、この方式で読み込みます。

II-3. 閉じる

現在表示している分子のウインドウを閉じ、そのために起動されている MolGraphV を終了します。

II-4. 全て閉じる

表示している分子のウインドウを全て閉じ、起動されている MolGraphV を全て終了します。

II-5. 座標の全保存

現在表示している分子の全原子の座標 (非表示状態の原子も含めて) をファイル (.pdb形式) に保存します。

II-6. 座標の選択保存

現在表示している分子の一部 (非表示状態の原子以外など) をファイル (.pdb形式) に保存します。

II-7. 画像の保存・コピー

現在表示している画像をファイルに保存、クリップボードにコピー、POV-Ray画像に変換を行ないます。

ファイルに保存では、以下の形式が選択できます。

GIF形式 (*.gif)

ビットマップ形式 (*.bmp)

JPEG形式 (*.jpg)

TIF形式 (*.tif)

PNG形式 (*.png)

Windows メタファイル形式 (*.wmf)

拡張メタファイル形式 (*.emf)

Encapsulated PostScript 形式 (*.eps)

さらに、フリーの画像ソフト IrfanView (<http://www.irfanview.com/>) が予めインストールされている場合は、GIF, JPEG, TIF, PNG形式の場合、背景が透明な画像として保存することもできます。

クリップボードにコピーする場合は、画像の解像度を設定することができます。

背景を透明にしてクリップボードにコピーを行なうためには、フリーの画像ソフト IrfanView (<http://www.irfanview.com/>) が予めインストールされている必要があります。

POV-Ray画像の作成では、3次元画像表示のフリーウェアPOV-Ray (<http://www.povray.org/>) 用のデータファイルを作成することができます。予めPOV-Rayがインストールされている場合は、POV-Rayを活用した精巧な3次元画像を作成することもできます。

II-8. 印刷

現在表示している画像を印刷します。

II-9. 最近使ったファイル

最近使ったファイルのリストが表示されます。希望のファイルをクリックすれば、読み込まれます。

II-10. 最近使ったフォルダー

最近使ったフォルダーのリストが表示されます。希望のフォルダーをクリックすれば、開かれます。

II-11. 終了

MolGraphV を終了します。

III. 表示

III-1. 表示設定



このサブウィンドウでは、分子構造表示の基本設定を行ないます。**原子と結合の基本表示、主鎖と側鎖等の表示方法、表示項目、および描画方法**を設定して下さい。**残基毎の表示設定**ボタンを押すと、次項のように、更に詳細な表示設定を行なうことができます。

III-2. 残基毎の表示設定



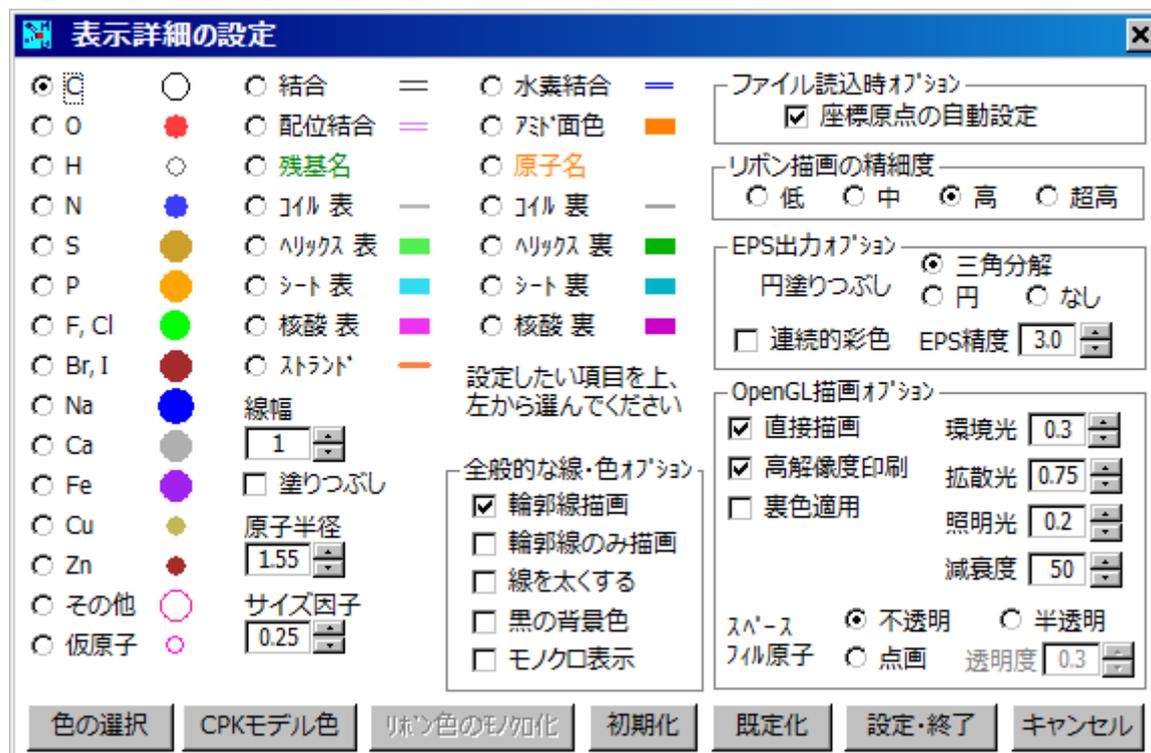
このサブウィンドウでは、残基毎の詳細な表示設定を行ないます。まず、対象とする残基を限定する場合は、その選択を行なう必要があります。各残基の前にあるチェックボックスは、描画等の操作を行なう対象にするか否かを設定するためのものです。**全て選択**などのボタンや**距離で選択**などのボタンを使って、対象とする残基の範囲を絞り込むことができます。次に、選択した残基(または非選択残基)の表示方法を指定します。また、**各残基名を右クリック**すると、残基毎の詳細な表示設定を行なうことができます。ボタンやチェックボックスなどの上にマウスを置くとヒントが表示されますので、参考にしてください。最終的な設定が終わったら、**描画設定**ボタンを押すと、その設定を反映した画像が主画面に描かれます。

III-3. 全画面表示

この項目がチェックされると、主画面の描画が、ディスプレイの全範囲に拡大されます。**ESC**キーを押せば、元のサイズに戻ります。

III-4. 表示詳細オプションの設定

下記に示すように、表示方法の詳細を設定することができます。各項目の意味については、マウスカーソルを合わせると表示されるヒントを参考にしてください。



III-5. 常時非表示原子の設定

分子の画像上で原子をクリックすることにより、常時表示しない(隠す)原子を指定します。

III-6. 常時非表示原子の設定解除

常時非表示原子の指定を解除します。

III-7. 常時表示原子の設定

分子の画像上で原子をクリックすることにより、常時表示する原子を指定します。

III-8. 常時表示原子の設定解除

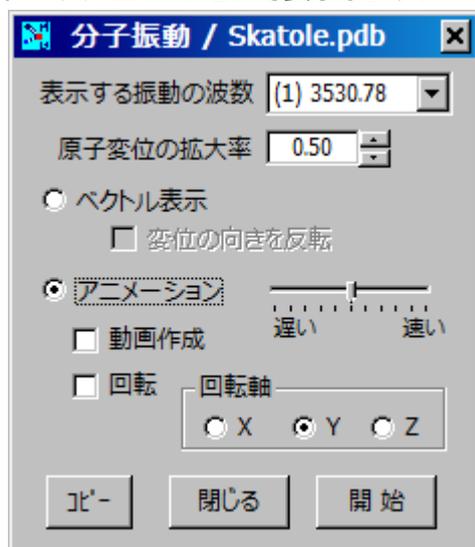
常時表示原子の指定を解除します。

III-9. 単位格子

結晶構造を表示している場合、単位格子も表示します。

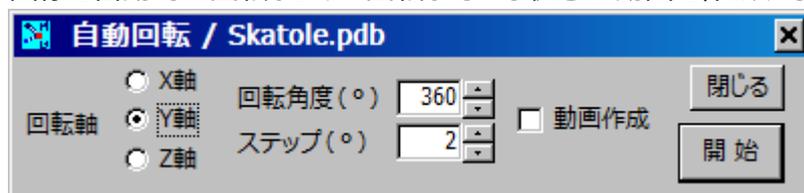
III-10. 分子振動

読み込んだファイルに分子振動に関するデータも含まれている場合、分子振動時の各原子の動きをベクトルやアニメーションで表示します。



III-11. 自動回転

画像を自動的に回転します。回転している状態の動画を作成することもできます。



III-12. 画像のサイズと位置

III-12-1. 画面サイズに合わせる

画像のサイズを画面のサイズに合わせて拡大縮小します。

III-12-2. 表示部分を画面中央に移動

画像に表示している部分を画面の中央に移動します。

III-12-3. 座標原点が画面中央になるように移動

座標の原点が画面の中央になるように描画します。

III-12-4. サイズと位置を直前の状態に戻す

画像のサイズと位置を直前に表示した状態に戻します。

III-12-5. サイズと位置を初期状態に戻す

画像のサイズと位置を、ファイルを読み込んだ直後の状態に戻します。

III-13. 座標原点(回転中心)の移動

III-13-1. 指定する原子の位置を座標原点に設定

クリックした原子の位置を座標原点に設定します。

III-13-2. 表示している部分の中心を座標原点に設定

表示している部分の中心を座標原点に設定します。

III-13-3. XY 座標原点を画面中心に固定

XY座標の原点が画面中心に来るように描画します。

III-13-4. 座標原点の位置を初期状態に戻す

座標原点の位置を、ファイルを読み込んだ直後の状態に戻します。

III-13-5. 座標原点に仮想原子を表示

座標原点に仮想原子を表示して、原点の位置が見えるようにします。

III-14. 分子配向

III-14-1. 現在の配向を初期状態として設定

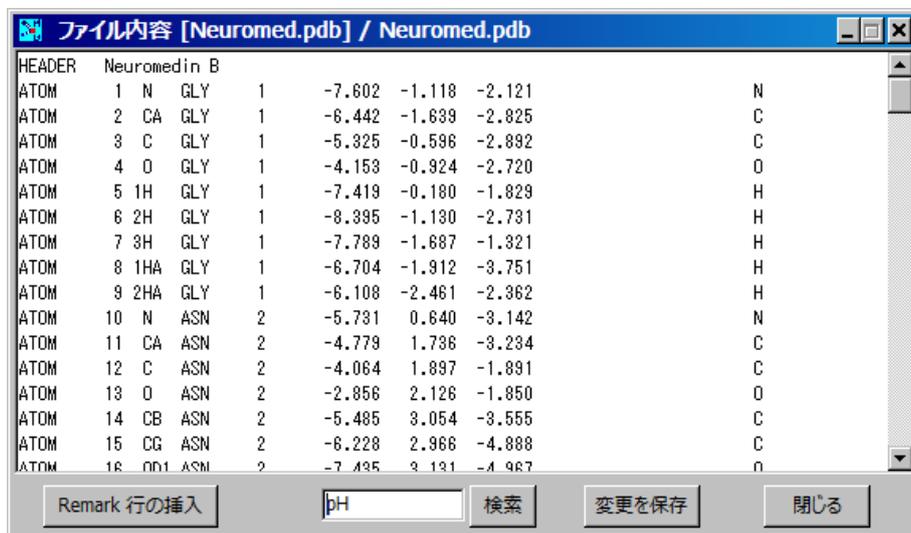
現在の分子の向きを、初期状態として登録します。

III-14-2. 分子配向を初期状態に戻す

分子の向きを初期状態に戻します。

III-15. データファイルの内容

読み込んだデータファイルの内容を表示します。編集することもできます。

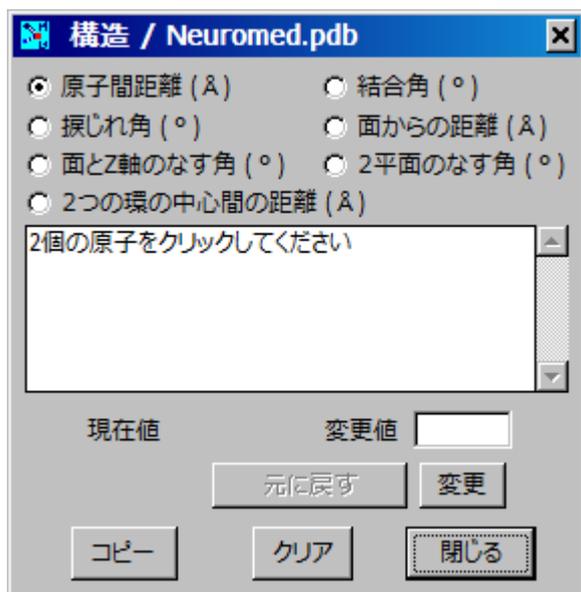


ファイル内容 [Neuromed.pdb] / Neuromed.pdb								
HEADER	Neuromedin B							
ATOM	1	N	GLY	1	-7.602	-1.118	-2.121	N
ATOM	2	CA	GLY	1	-6.442	-1.639	-2.825	C
ATOM	3	C	GLY	1	-5.325	-0.596	-2.892	C
ATOM	4	O	GLY	1	-4.153	-0.924	-2.720	O
ATOM	5	1H	GLY	1	-7.419	-0.180	-1.829	H
ATOM	6	2H	GLY	1	-8.395	-1.130	-2.731	H
ATOM	7	3H	GLY	1	-7.789	-1.687	-1.321	H
ATOM	8	1HA	GLY	1	-6.704	-1.912	-3.751	H
ATOM	9	2HA	GLY	1	-6.108	-2.461	-2.362	H
ATOM	10	N	ASN	2	-5.731	0.640	-3.142	N
ATOM	11	CA	ASN	2	-4.779	1.736	-3.234	C
ATOM	12	C	ASN	2	-4.064	1.897	-1.891	C
ATOM	13	O	ASN	2	-2.856	2.126	-1.850	O
ATOM	14	CB	ASN	2	-5.485	3.054	-3.555	C
ATOM	15	CG	ASN	2	-6.228	2.966	-4.888	C
ATOM	16	OD1	ASN	2	-7.435	3.131	-4.967	O

Remark 行の挿入 pH 検索 変更を保存 閉じる

IV. 構造

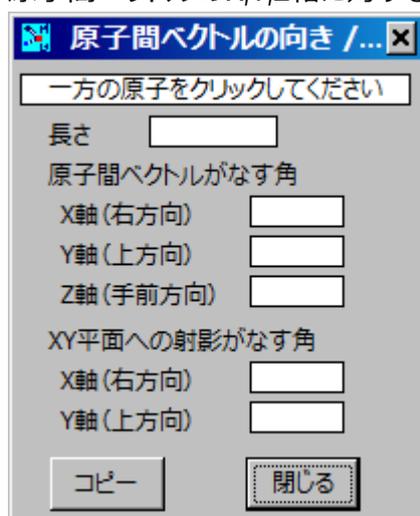
IV-1. 距離と角度



原子間距離、結合角、振れ角、面からの距離、面とZ軸とのなす角、2平面のなす角、または、2つの環の中心間の距離を求めます。原子間距離、結合角、振れ角を求めるためには、対応する原子を画面上で順次クリックしてください。面を指定する場合は、その面内の3個の原子をクリックしてください。環を指定する場合は、環の構成原子を順次クリックし、最後に、出発原子をクリックします。原子間距離、結合角、振れ角、面からの距離については、その値を変更することもできます。

IV-2. 原子間ベクトルの向き

原子間ベクトルのX,Y,Z軸に対する角度とXY平面となす角を求めます。



原子間ベクトルを定義するための2個の原子をクリックしてください。

IV-3. ペプチド主鎖のコンフォメーション

ペプチド・タンパク質の場合、クリックしたアミノ酸残基のペプチド主鎖のコンフォメーションを表示します。コンフォメーションを決定する個々の振れ角の値を変更することもできます。



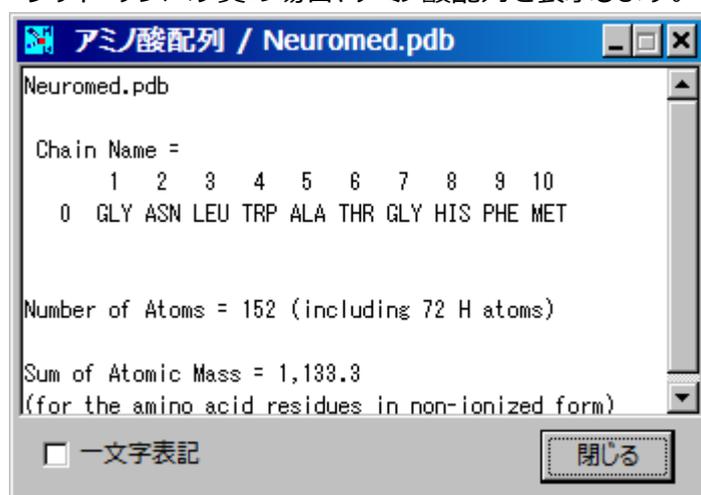
IV-4. 水素結合のリスト

含まれている水素結合のリスト(水素供与・受容原子とその原子間距離)を表示します。



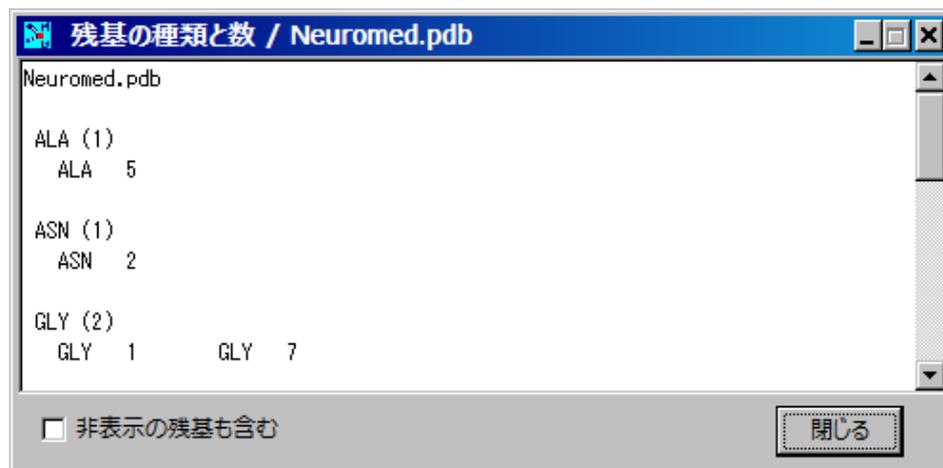
IV-5. アミノ酸配列

ペプチド・タンパク質の場合、アミノ酸配列を表示します。



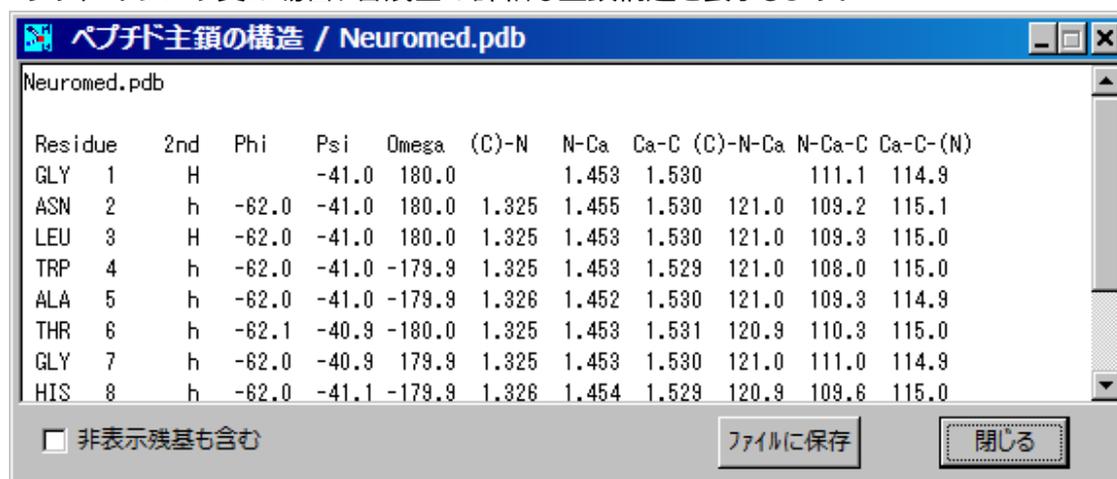
IV-6. 残基の種類と数

ペプチド・タンパク質や核酸の場合、含まれている残基の種類と数を表示します。



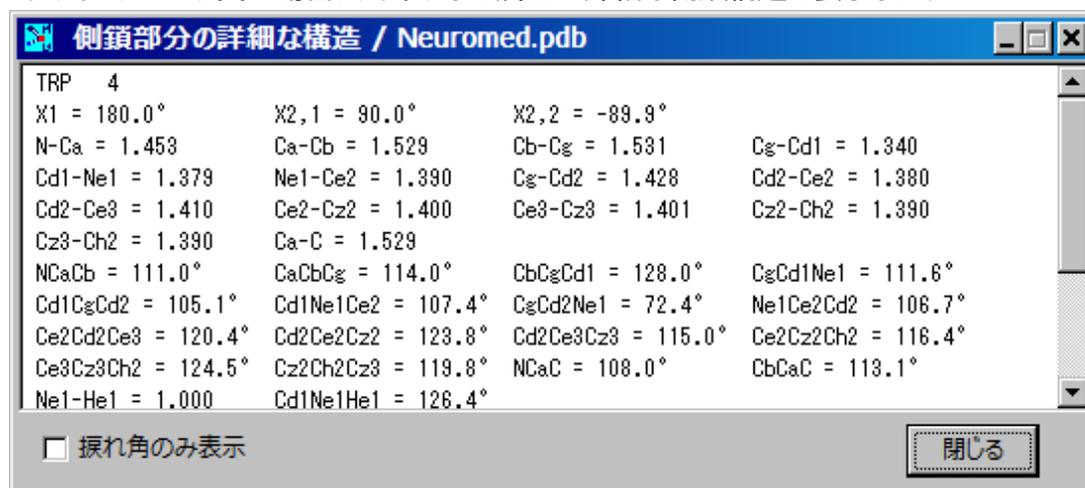
IV-7. ペプチド主鎖の詳細な構造

ペプチド・タンパク質の場合、各残基の詳細な主鎖構造を表示します。



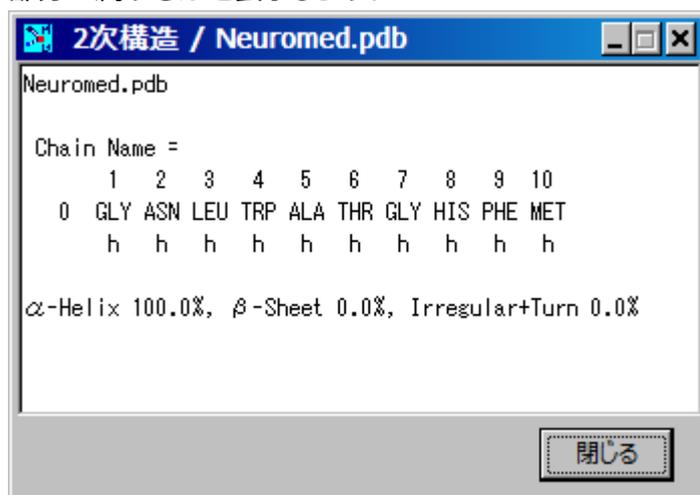
IV-8. アミノ酸側鎖の詳細な構造

ペプチド・タンパク質の場合、クリックした残基の詳細な側鎖構造を表示します。



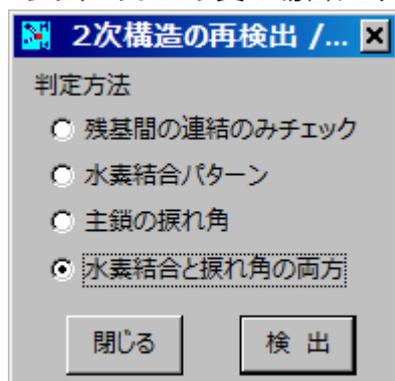
IV-9. 2次構造

ペプチド・タンパク質の場合、各アミノ酸残基が2次構造 (α -ヘリックス、 β -シート、不規則、ターン) のどの部分に属するかを表示します。



IV-10. 2次構造の再検出

ペプチド・タンパク質の場合、2次構造を原子座標から再計算します。



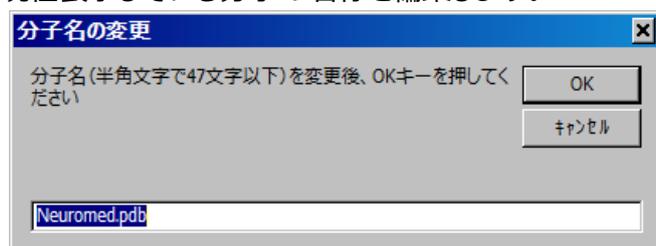
IV-11. PDBファイル中の2次構造

ペプチド・タンパク質の場合、読み込んだファイル中に2次構造が記されている場合、その2次構造を用います。

V. 編集

V-1. 分子名

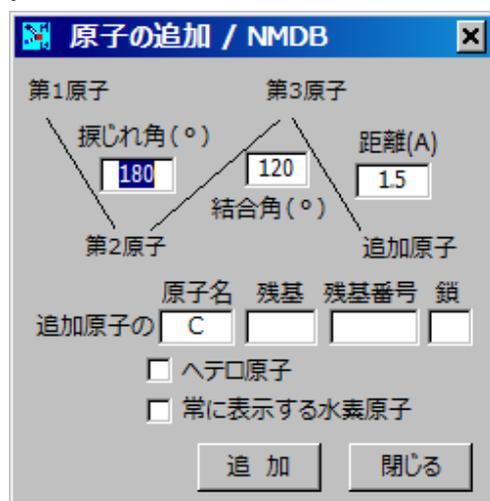
現在表示している分子の名称を編集します。



V-2. 原子

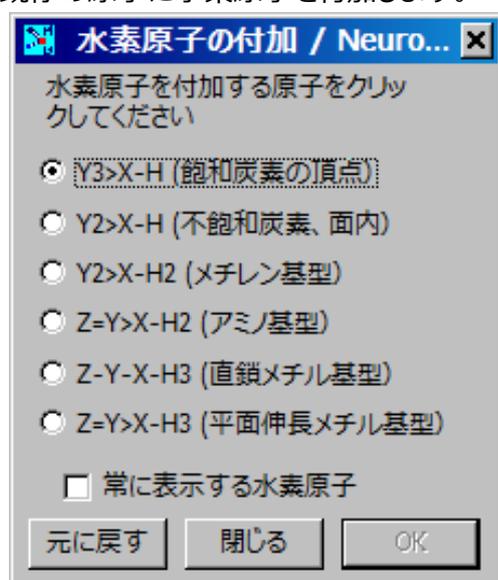
V-2-1. 追加

既存の原子を基準にして、結合距離、結合角、振れ角を指定することにより、新たな原子を生成します。



V-2-2. 水素原子の付加

既存の原子に水素原子を付加します。



V-2-3. 削除

クリックした原子を削除します。

V-2-4. 孤立原子の削除

他の原子と結合していない原子(孤立原子)を全て削除します。

V-2-5. 削除

クリックした原子を削除します。

V-2-6. 復元/完全削除

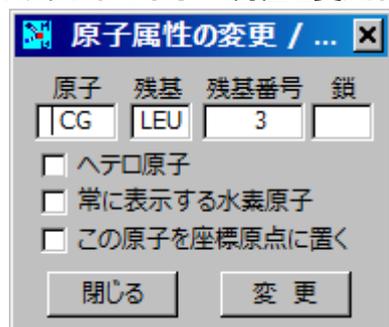
削除した原子を復元、または、復元できないように完全に削除します。

V-2-7. 全水素原子の完全削除

全ての水素原子を完全に削除します。

V-2-8. 属性変更

クリックした原子の属性を変更します。



V-2-9. 番号付替

原子の番号を1から順に付け直します。

V-3. 結合

V-3-1. 追加

クリックした2原子間に新たな結合を生成します。

V-3-2. 削除

クリックした2原子間の結合を削除します。

V-3-3. 復元/完全削除

削除した結合を復元、または、復元できないように完全に削除します。

V-3-4. 再検出

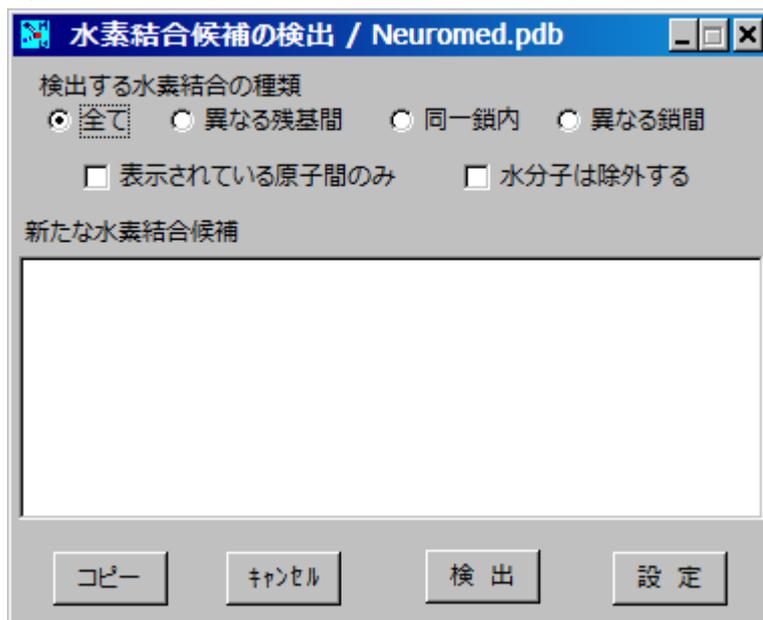
結合の自動検出をやり直します。

V-3-5. 水素結合の追加

クリックした水素供与原子と受容原子の間に水素結合を生成します。

V-3-6. 水素結合候補の検出

水素結合の候補を、指定した条件下で、検出します。



V-3-7. 水素結合の一括削除

水素結合の追加や水素結合候補の検出で新たに生成した水素結合を全て削除します。読み込んだ構造データファイル中で定義されている水素結合も同時に削除することもできます。

V-4. 残基

V-4-1. 削除

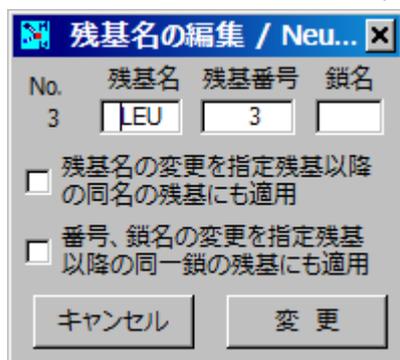
クリックした残基を削除します。

V-4-2. 復元

削除した残基を復元します。

V-4-3. 残基名・番号変更

クリックした残基の名前と番号を変更します。



V-4-4. 水分子の全削除

全ての水分子を削除します。

V-4-5. 番号付替

各鎖の残基番号を昇順に付け直します。ペプチド鎖のN末端(核酸の場合は、5'末端)の残基の新しい番号を入力してください。

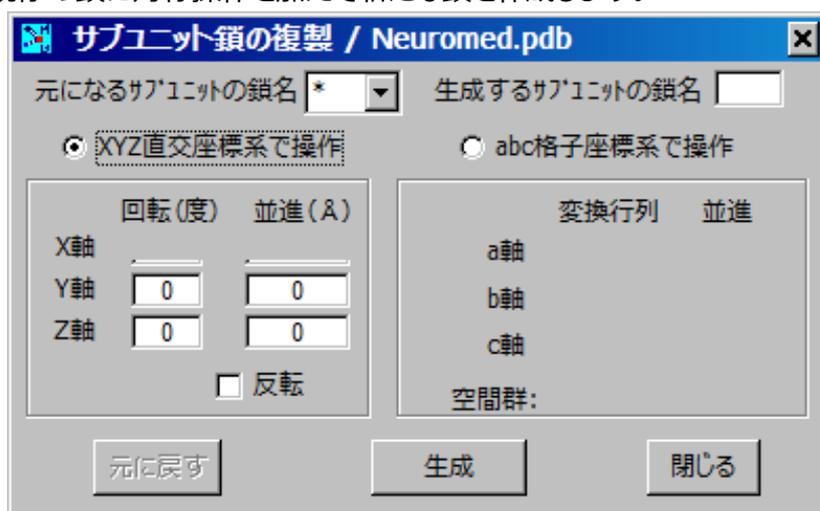
V-5. サブユニット鎖

V-5-1. 操作対象鎖の選択

複数の鎖からなる場合、回転や移動などの操作を行なう鎖を指定します。

V-5-2. 対称操作で複製

既存の鎖に対称操作を加えて新たな鎖を作成します。



V-5-3. 削除

指定した鎖を削除します。

V-5-4. 復元/完全削除

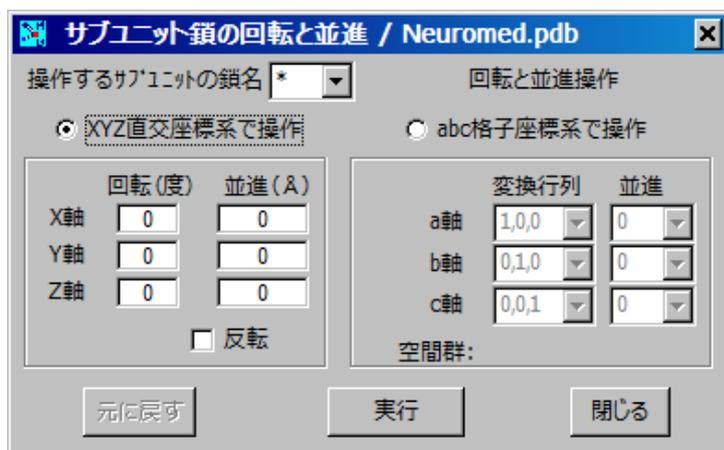
削除した鎖を復元または完全に(復元不可能な状態に)削除します。

V-5-5. 中心を座標原点に設定

指定した鎖の中心をXYZ座標の原点とします。回転の中心が変わります。

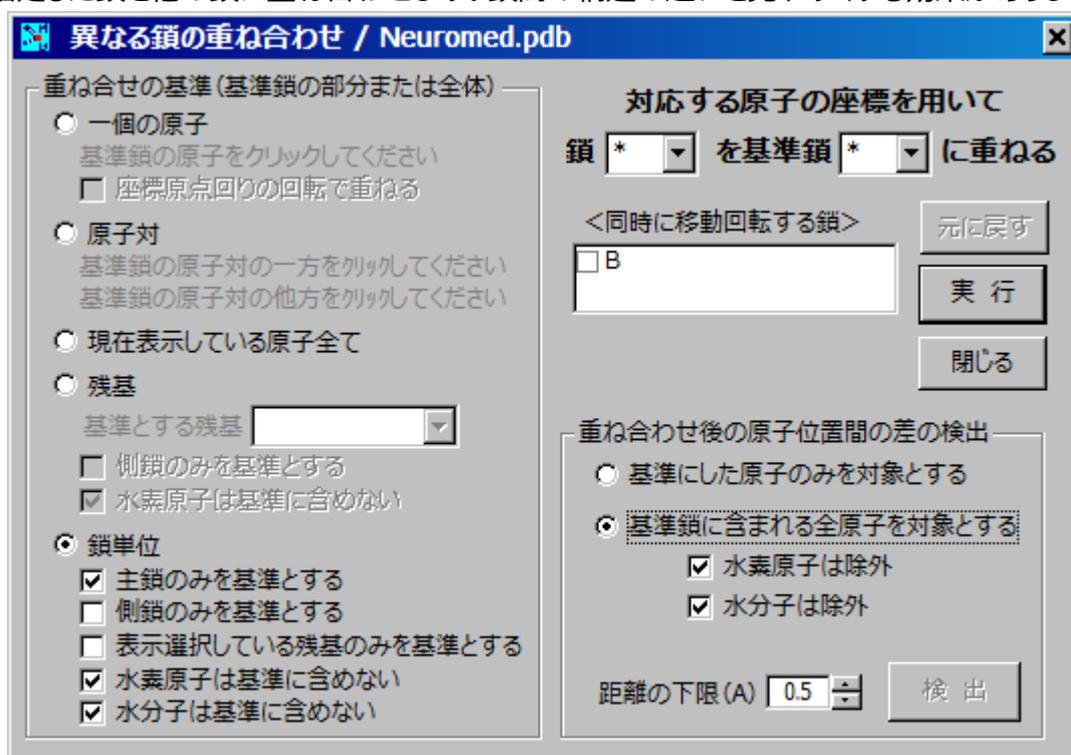
V-5-6. 回転と並進

指定した鎖に回転・並進の操作を行ないます。



V-5-7. 異なる鎖の重ね合わせ

指定した鎖を他の鎖に重ね合わせます。鎖間の構造の違いを見やすくする効果があります。

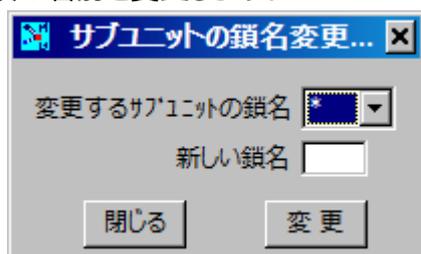


V-5-8. 異なる鎖の繋ぎ合わせ

指定した鎖を他の鎖につなぎ合わせます。2原子をクリックして、繋ぎ合わせる鎖間の新たな結合を指定してください。

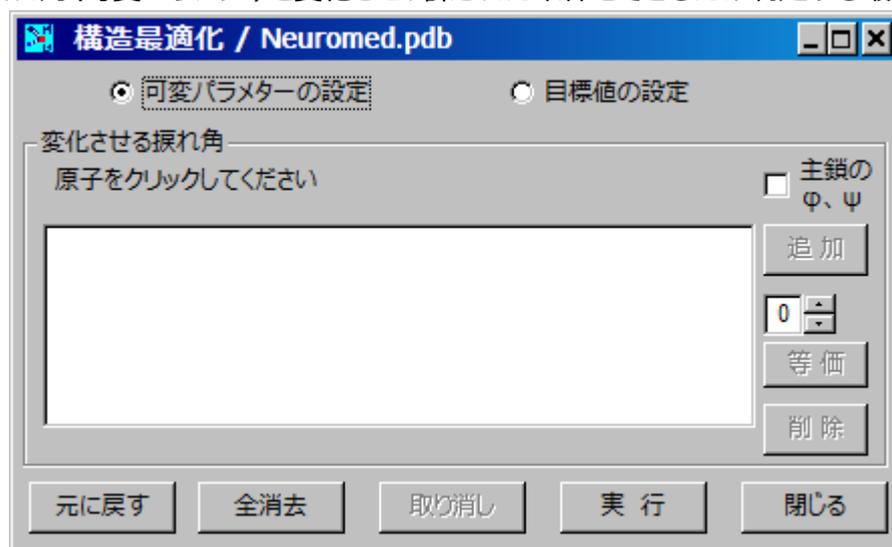
V-5-9. 鎖名変更

鎖の名前を変更します。



V-6. 構造最適化

指定した原子間距離、結合角、振れ角などが指定した値(目標値)にできるだけ近くなるように、指定した振れ角(可変パラメータ-)を変化させ、課された条件をできるだけ満足する最適構造を見つけ出します。



VI. ツール

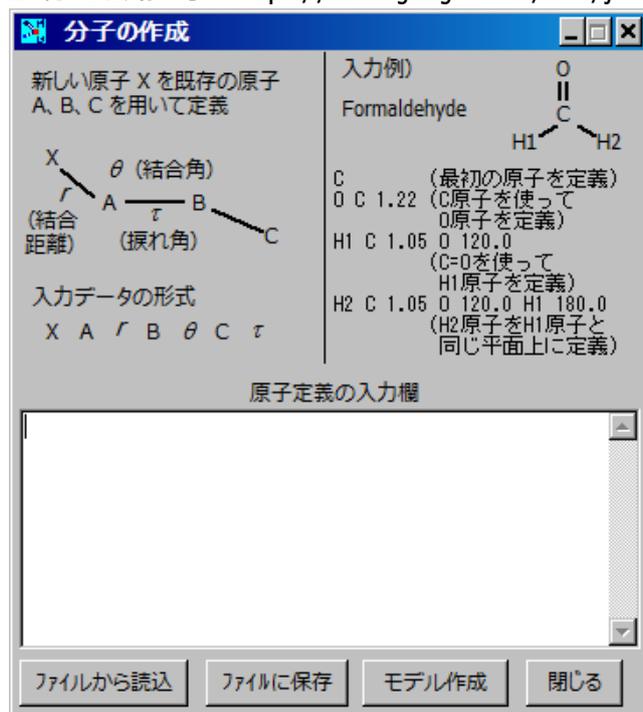
VI-1. ペプチドの作成

アミノ酸配列と構造パラメーター（結合距離、結合角、振れ角）を入力して、ペプチドを作成します。



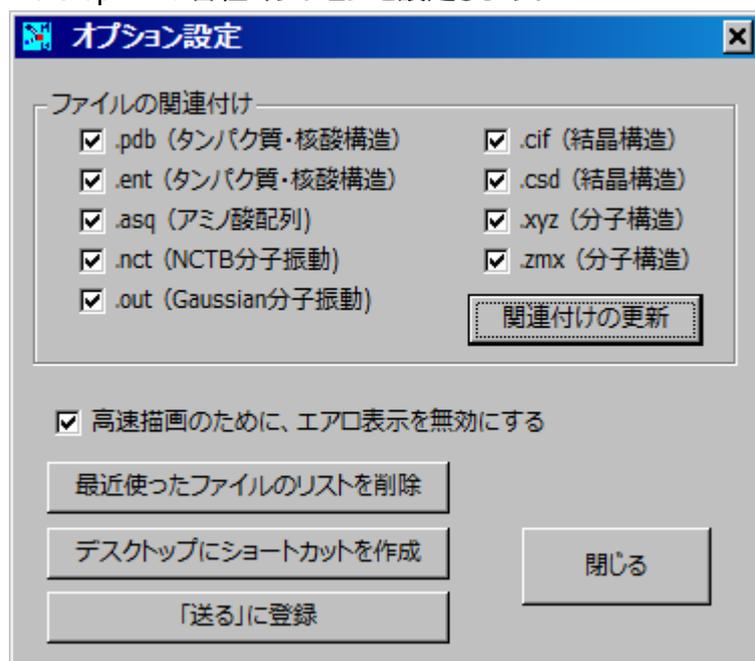
VI-2. 分子の作成

Z-行列法 (参考: <https://sites.google.com/site/jonoonweb/tips/zmat>) を用いて、分子を作成します。



VI-3. オプション

MolGraphV の各種オプションを設定します。



関連付けの更新

チェックしてある拡張子のファイルを MolGraphV に関連付け、ファイルをダブルクリックすると、MolGraphV が起動するように設定します。関連付けの更新は、管理者アカウントでログオンした場合にしか行なえません。

高速描画のために、エアロ表示を無効にする

Windows 7以降で利用できるエアロ表示が設定されていると、画像の高速描画が行なえません。そこで、このチェックボックスをチェックすると、MolGraphV が起動している間だけ、エアロ表示を無効にします。

最近使ったファイルのリストを削除

最近使ったファイルとフォルダーのリストを消去します。

デスクトップにショートカットを作成

デスクトップに MolGraphV のショートカットを作成します。

「送る」に登録

「Send To」フォルダーに MolGraphV のショートカットを作成し、ファイルを右クリックして、MolGraphV で開けるようにします。

VII. ウィンドウ

複数起動している MolGraphV のどれを全面に表示するかを指定します。