

文部科学省「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくり

ABINIT-MP プログラム

ハンズオンセミナー

手引書

2014 年 8 月 7 日

東京大学生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター

目次

1	課題 1 : TrpCage の IFIE 解析と CHPI 解析	1
1.1	入力データ作成	1
1.2	データの転送と FMO 計算の実行	7
1.3	CHPI 解析	9
1.4	IFIE 解析	12
2	課題 2 : エストロゲン受容体ーリガンド複合体の IFIE 解析	15
2.1	入力データ作成	15
2.2	FMO 計算	15
2.3	IFIE 解析	16
3	課題 3 : HIV-1 プロテアーゼー阻害剤の複合体計算のための手動フラグメント分割	19
3.1	入力データ作成	19
3.2	FMO 計算	29
3.3	IFIE 解析	29
4	課題 4 : Crambin のグリッドデータ解析	32
4.1	入力データ作成	32
4.2	FMO 計算	34
4.3	グリッド可視化解析	34
5	解析データ一覧	38
6	利用ソフト一覧	39

1 課題 1 : TrpCage の IFIE 解析と CHPI 解析

本課題では小規模タンパク質 TrpCage の FMO-MP2 計算の入力データの作成、計算の実行を行い、フラグメント間相互作用エネルギー (IFIE) 及び CH/ π (CHPI) 相互作用解析を行います。

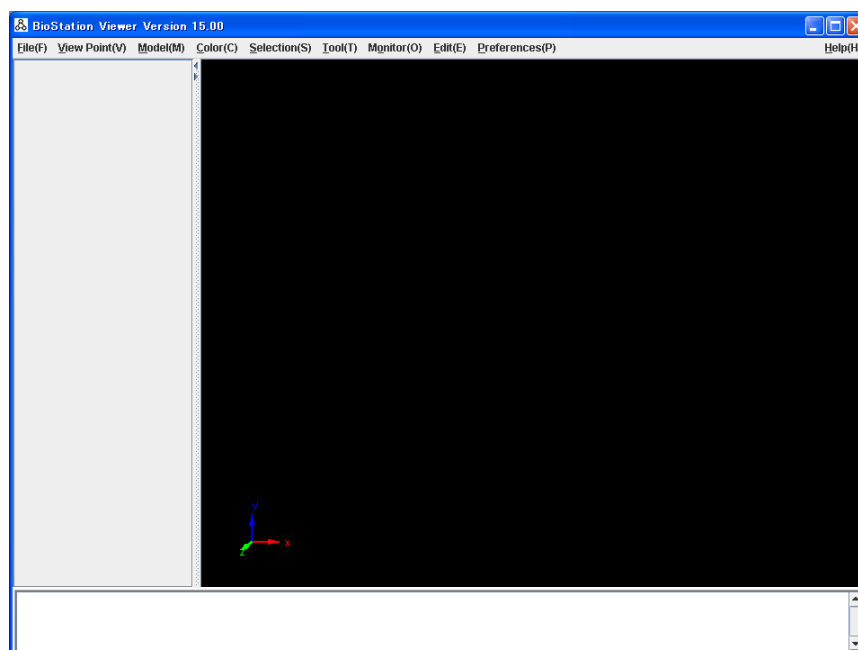
※今回の演習では、計算時間の短縮のため、HF/STO-3G で計算を流します。

1.1 入力データ作成

BioStation Viewer を起動します。デスクトップ上のアイコンをクリックします。



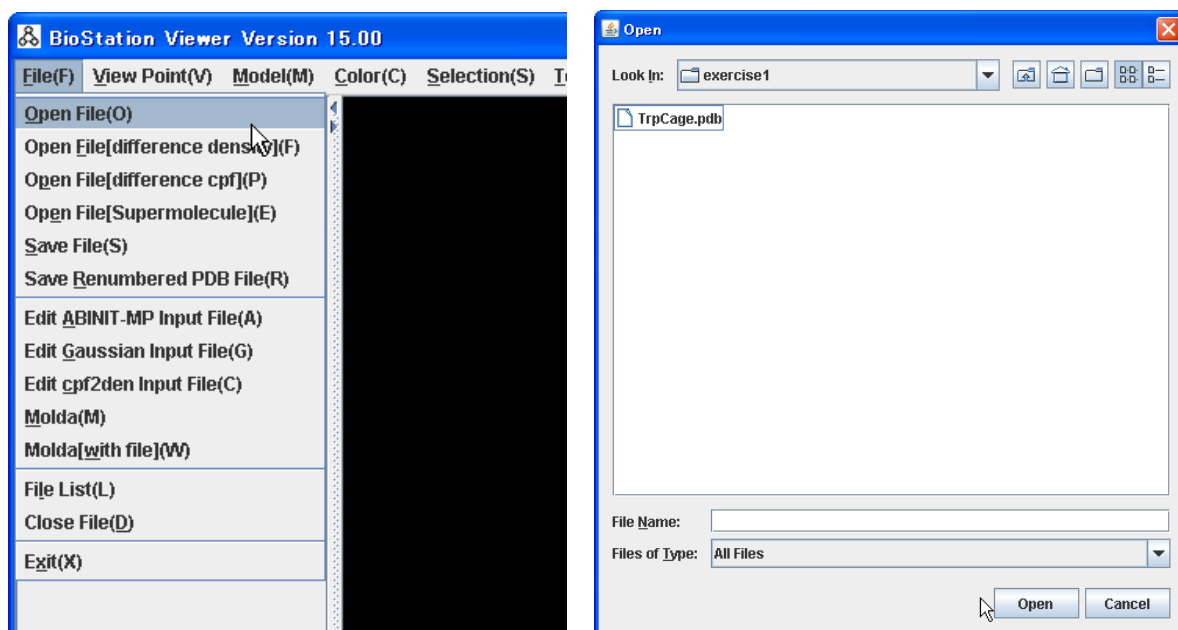
BioStation Viewer が起動します。



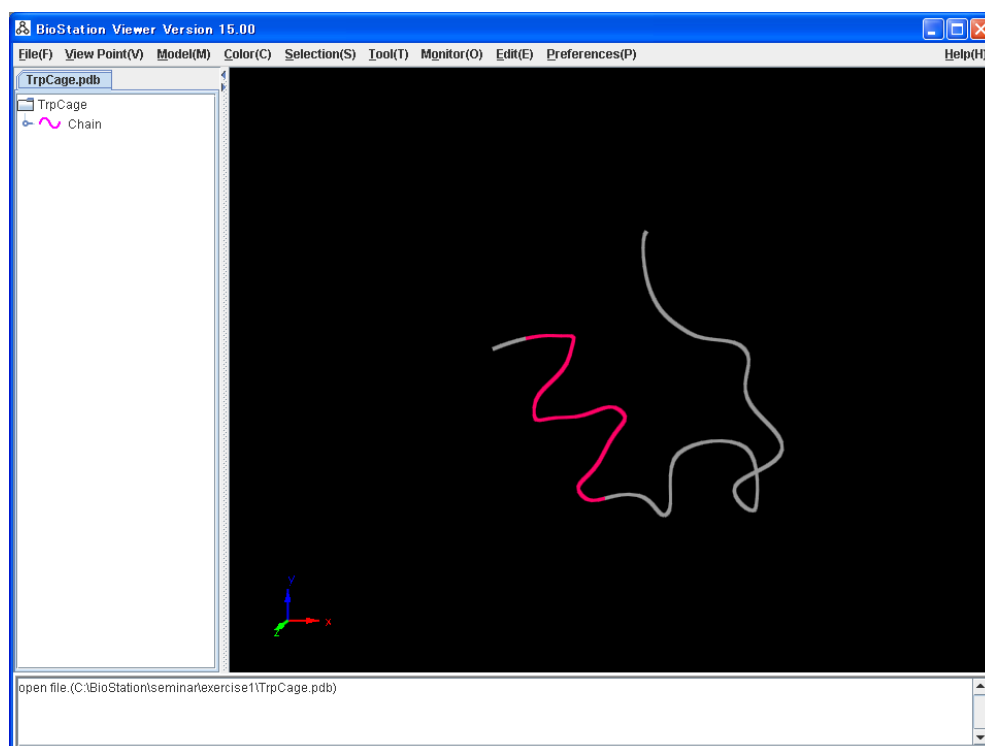
TrpCage の構造を BioStation Viwer 読み込みます。TrpCage の構造は以下のフォルダに格納されています。

C:\BioStation\seminar\exercise1\TrpCage.pdb

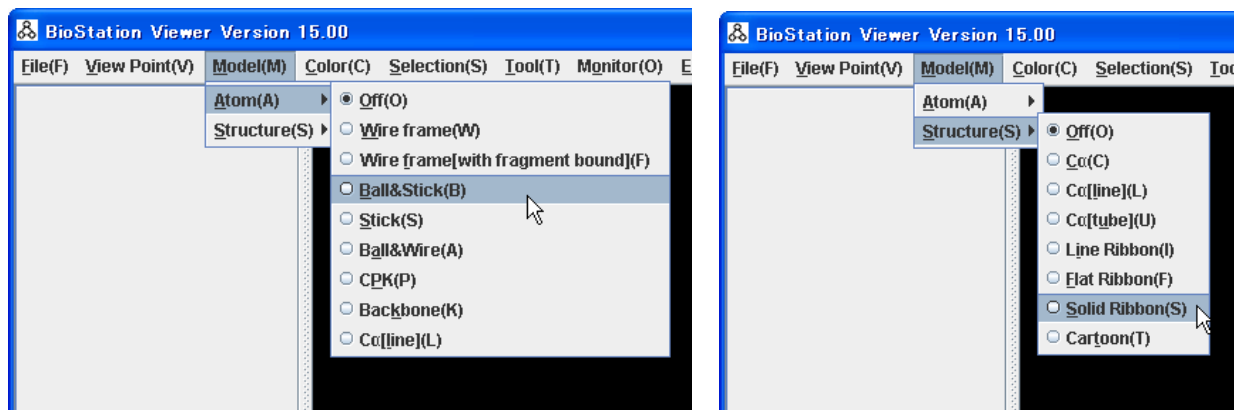
構造ファイル (PDB ファイル) を読み込むには、File→Open File を実行するか、BioStation Viwer の画面に PDB ファイルをドラッグ&ドロップします。この説明以降はドラッグ&ドロップの方法でのみ説明します。



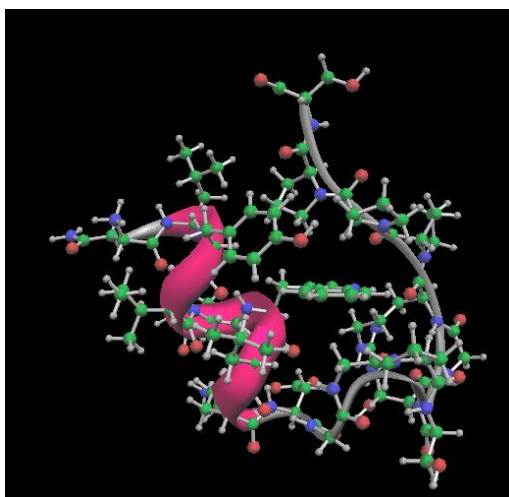
TrpCage の構造が表示されます。デフォルトの表示ではタンパク質の骨格のみが表示されます。(主鎖の C α 原子をラインでつないだ表示)



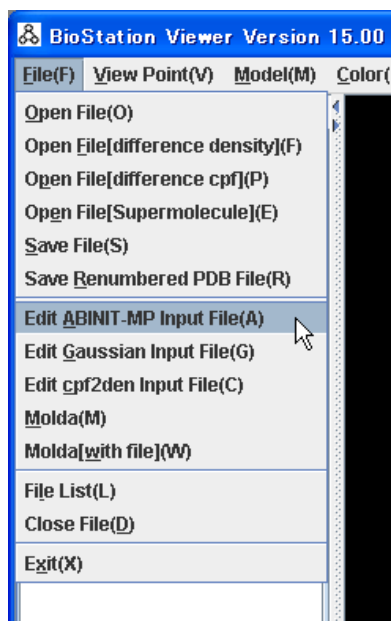
Model→Atom→Ball&Stick と Model→Structure→Solid Ribbon を実行して表示方法を変更しましょう。



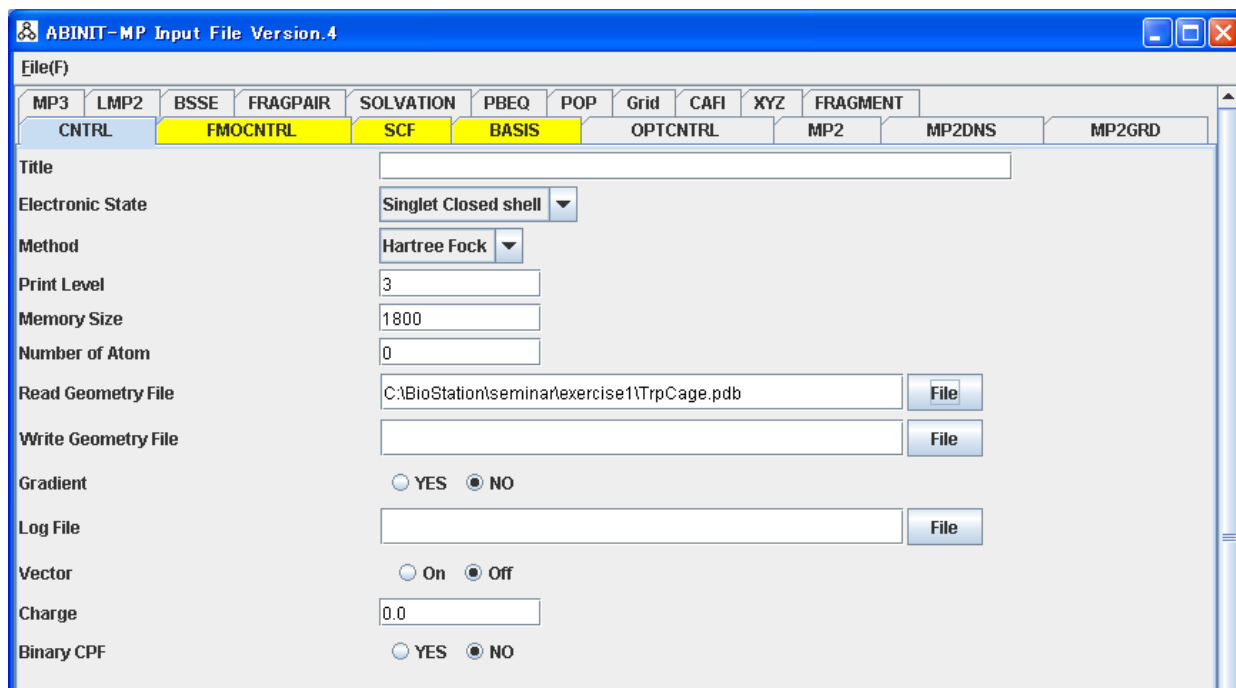
TrpCage が以下のように表示されます。



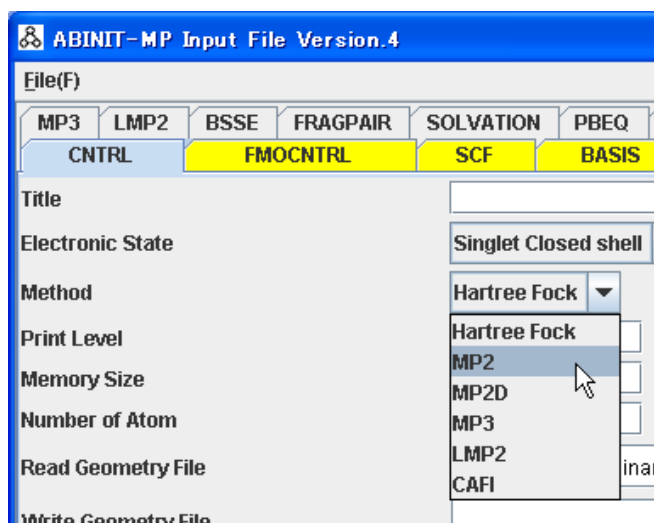
FMO 計算の入力ファイルを作成するには、File→Edit ABINIT-MP Input File を実行します。



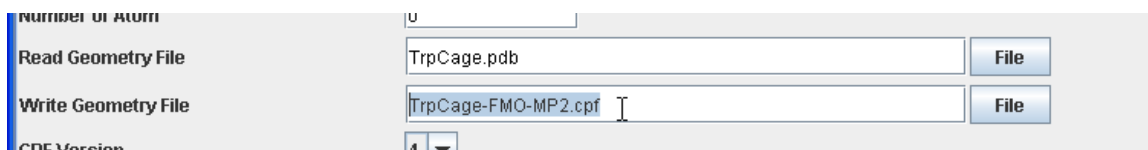
File→Edit ABINIT-MP Input File を実行すると、以下のウィンドウが起動します。CNTRL、FMOCNTRL、SCF など複数のタブがあり、それらの中で各種のパラメーターが指定できます。



本課題ではまず、CNTRL タブの Method を MP2 にします。



Read Geometry File を TrpCage.pdb とします。Write Geometry File に TrpCage-FMO-MP2.cpf と入力します。



次に、FMOCTRL タブにて FMO 関連のパラメータを設定します。本課題では特に変更はありません。

ABINIT-MP Input File Version 4.0

File(F)

MP3 LMP2 BSSE FRAGPAIR SOLVATION PBEQ POP Grid CFI XYZ FRAGMENT

CNTRL FMOCTRL SCF BASIS OPTCNTRL MP2 MP2DNS MP2GRD

FMO Calculation ☒ On ☐ Off

FMO Level FMO2

LMO Type ANO

Auto Fragmentation ☒ On ☐ Off

Number of Residue for each Fragment 1

Polynucleotide Base/Sugar+Phosphate

Ligand Charge

Aminoacid +amino

Number of Fragment 0

Rsoiv

Approximation Level(ptc) 2.0

Approximation Level(aoc) 0.0

ESP Ptc Multipole ☐ On ☒ Off Max Order Multipole Ptc 10

Threshold of Dimer 2.0

Dimer ES Multipole ☐ On ☒ Off Max Order Multipole 10 Ldimer CMM 5.0

NP 1

Max SCC cycle 250

Max SCC Energy 5.0E-7

Write SCC File File

Read SCC File File

Write Monomer MP2 File File

Read Monomer MP2 File File

Write Dimer ES File File

Read Dimer ES File File

BASIS タブにて基底関数関連のパラメータを指定します。本課題では特に変更はありません。

ABINIT-MP Input File Version 4.0

File(F)

MP3 LMP2 BSSE FRAGPAIR SOLVATION PBEQ POP Grid CFI XYZ FRAGMENT

CNTRL FMOCTRL SCF BASIS OPTCNTRL MP2 MP2DNS MP2GRD

Basis Set

STO-3G

3-21G

☒ 6-31G 6-31G

☐ 6-311G 6-311G

4-31G

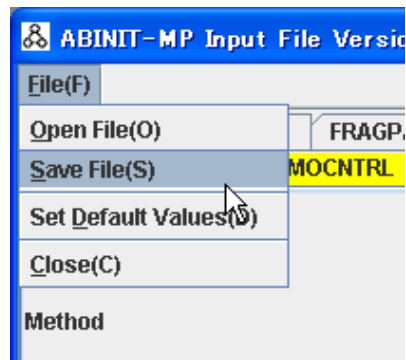
cc-pVDZ

Diffuse ON ☐ YES ☒ NO

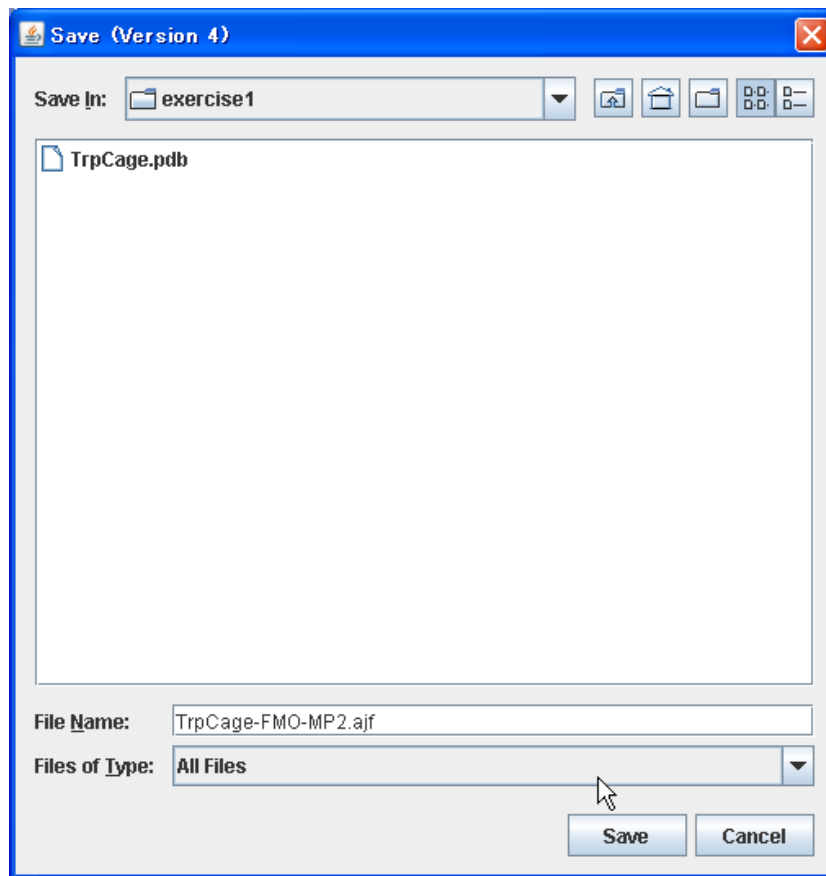
Element

Fragment

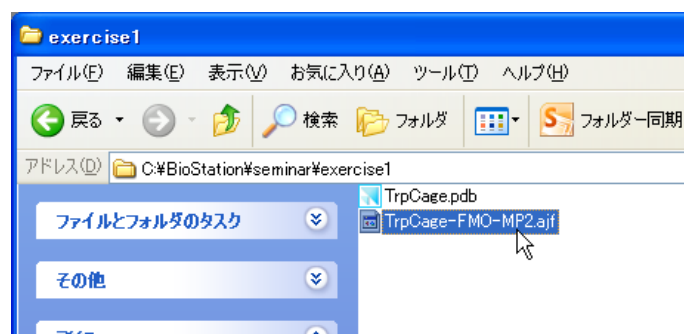
パラメータの設定が完了したら File→Save File を実行して入力ファイルを保存します。



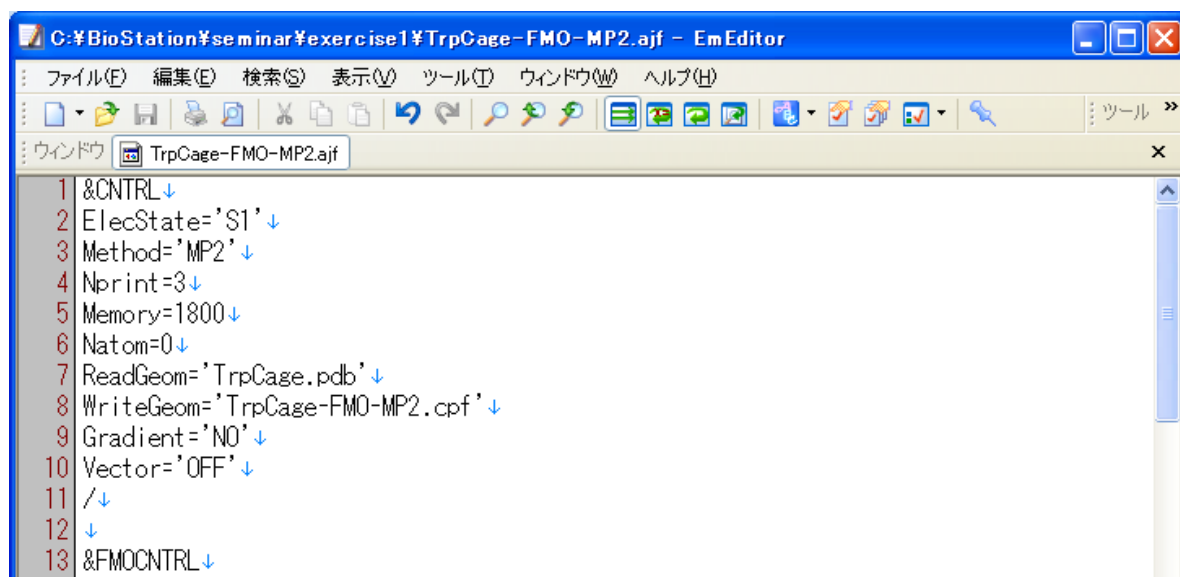
ここでは TrpCage-FMO-MP2.ajf という名前で保存します。



PDB ファイルのあるフォルダに TrpCage-FMO-MP2.ajf が出力されます。



テキストエディタなどで開いて中身を確認すると良いでしょう。



```
C:\BIOStation\seminar\exercise1\TrpCage-FMO-MP2.ajf - EmEditor
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ツール(T) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)
ウインドウ TrpCage-FMO-MP2.ajf
1 &CNTRL↓
2 ElecState='S1'↓
3 Method='MP2'↓
4 Nprint=3↓
5 Memory=1800↓
6 Natom=0↓
7 ReadGeom='TrpCage.pdb'↓
8 WriteGeom='TrpCage-FMO-MP2.cpf'↓
9 Gradient='NO'↓
10 Vector='OFF'↓
11 /↓
12 ↓
13 &FMOCNTRL↓
```

入力データの作成は以上で完了です。

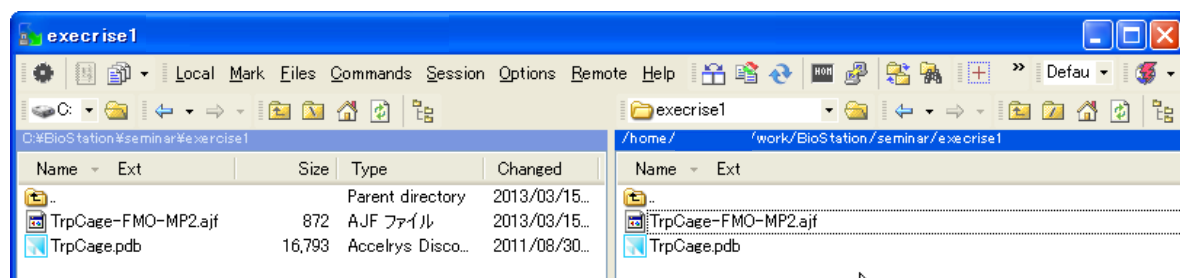
今回の演習では、計算時間の短縮のため、HF/STO-3G レベルの計算を流します。

まず、TrpCage-FMO-MP2.ajf をコピーして、TrpCage-FMO-HF.ajf を作成します。テキストエディタで開き、&CNTRL ネームリストの Method='MP2'のところを、Method='HF'に変更します。さらに、&BASIS ネームリストの 'BasisSet='6-31G' を'BasisSet=STO-3G'に変更します。

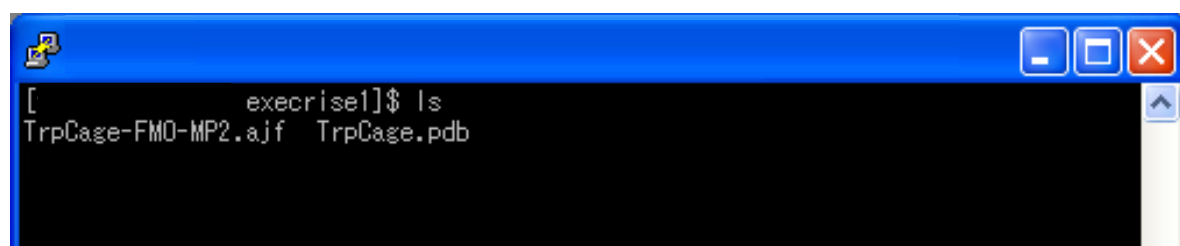
これで、HF/STO-3G 計算用の入力ファイルができました。

1.2 データの転送と FMO 計算の実行

次に Linux の計算サーバに入力データ (PDB ファイルと AJF ファイル) をアップロードし、FMO 計算を実行します。ここでは WinSCP というソフトウェアを用います。



ターミナル画面を開き、アップロードした入力データがあるディレクトリに移動します。



AJF ファイルを開き、パラメータをもう一度確認します。

```
vi TrpCage-FMO-MP2. ajf
```

以下、計算機ごとに変更する必要があるパラメータを示します。これらは計算を流す前によく確認し、必要に応じて変更します。

```
&CNTRL
...
Memory=1800    ← 1 プロセスあたりの使用メモリ上限
...
ReadGeom='TrpCage.pdb' ← PDB ファイルへのパス (計算機によっては絶対パスで指定しないとエラーになる)
WriteGeom='TrpCage-FMO-MP2.cpf'
...
/

&FMOCNTRL
...
NP=1 ← 1 フラグメントを計算するのに使用するプロセス数
...
```

例えば 48 プロセスの並列計算を実行する場合は以下のように ABINIT-MP を実行します。

```
mpirun -n 48 abinitmp < TrpCage-FMO-MP2. ajf >& TrpCage-FMO-MP2. log &
```

計算機によっては pjsub などのコマンドを使用してジョブを投入する必要があります。RIST FX10 の場合は、例えば以下のような pjsub 用のスクリプト(rum_smp.sh)を作成します。

```
#!/bin/sh

#----- pjsub option -----#

#PJM -L "node=1"                # 使用するノード数(FX10 では、1 ノードあたり 16 コア)
#PJM --mpi "proc=4"             # 使用する全プロセス数 (プロセス数=使用コア数/スレッド数)
#PJM -L "elapsed=06:00:00"      # 総計算時間の指定 (FX10 の会話ジョブは最大 6 時間)
#PJM -j

. /work/system/Env_base        #環境変数の設定
export OMP_NUM_THREADS=4       #スレッドの指定 (1 プロセスあたりに使用するコア数)

#----- ABINIT-MP option -----#
ABINIT_DIR=/home/apps/ABINIT-MP/bin # ABINIT-MP バイナリのあるディレクトリを指定
FILE_NAME=TrpCage-FMO-MP2         # ファイル名
AJF_NAME=$FILE_NAME. ajf          # 入力ファイル
OUT_NAME=$FILE_NAME. log          # 出力ファイル

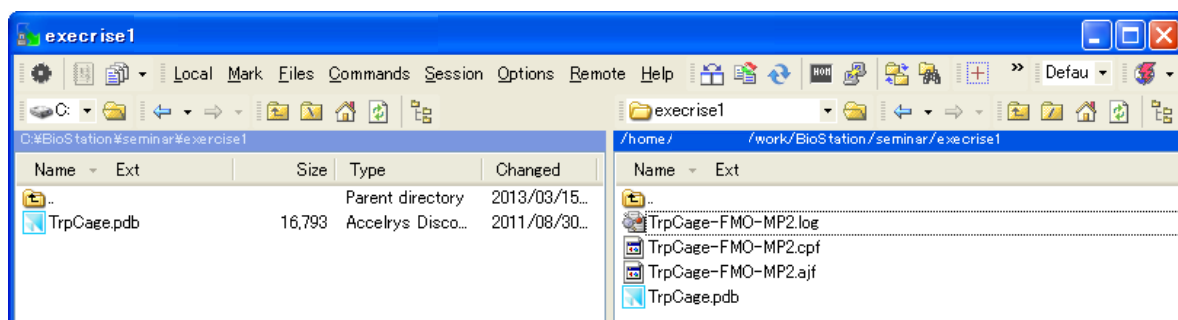
#----- Program execution -----#
$ABINIT_DIR/tools/ mkinp_pub6. tcl < $AJF_NAME > $FILE_NAME.new. ajf      # 入力ファイルの成型
mpiexec -stdin $FILE_NAME.new. ajf -of $OUT_NAME $ABINIT_DIR/abinitmp_smp # FMO 計算実行
```

作成したスクリプトを pjsub コマンドでサブミットします。

```
pjsub --interact run_smp.sh
```

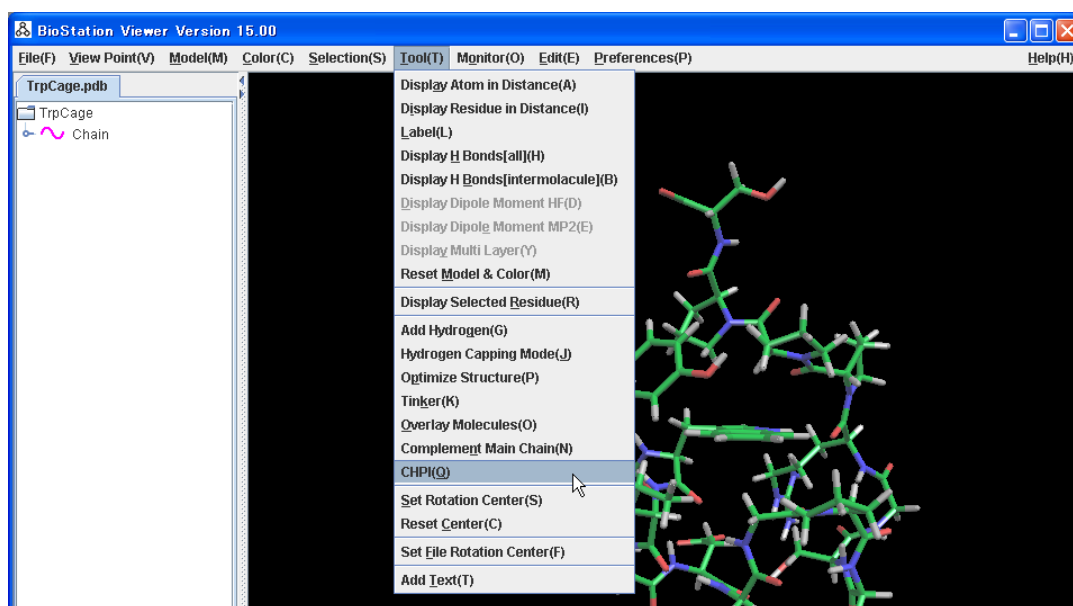
ジョブの投入方法は計算機ごとに異なりますので、詳しい使い方は各計算機のマニュアルを参照するか管理者にお問い合わせください。なお、今回は **BioStation Viewer** を使ってインプットファイルを作成したため必要ありませんが、ユーザーが手作業でインプットファイルを作成した場合はネームリストを正しい順番に並び替えるなどのインプットファイルの整形を行う **mkinp** という **tcl** スクリプトを通す必要があります。**mkinp** の使い方は **ABINIT-MP** のユーザーマニュアルに記載されていますのでそちらをご参照ください。

計算が完了すると **TrpCage-FMO-MP2.log** と **TrpCage-FMO-MP2.cpf** が出力されるのでこれらのファイルをダウンロードします。



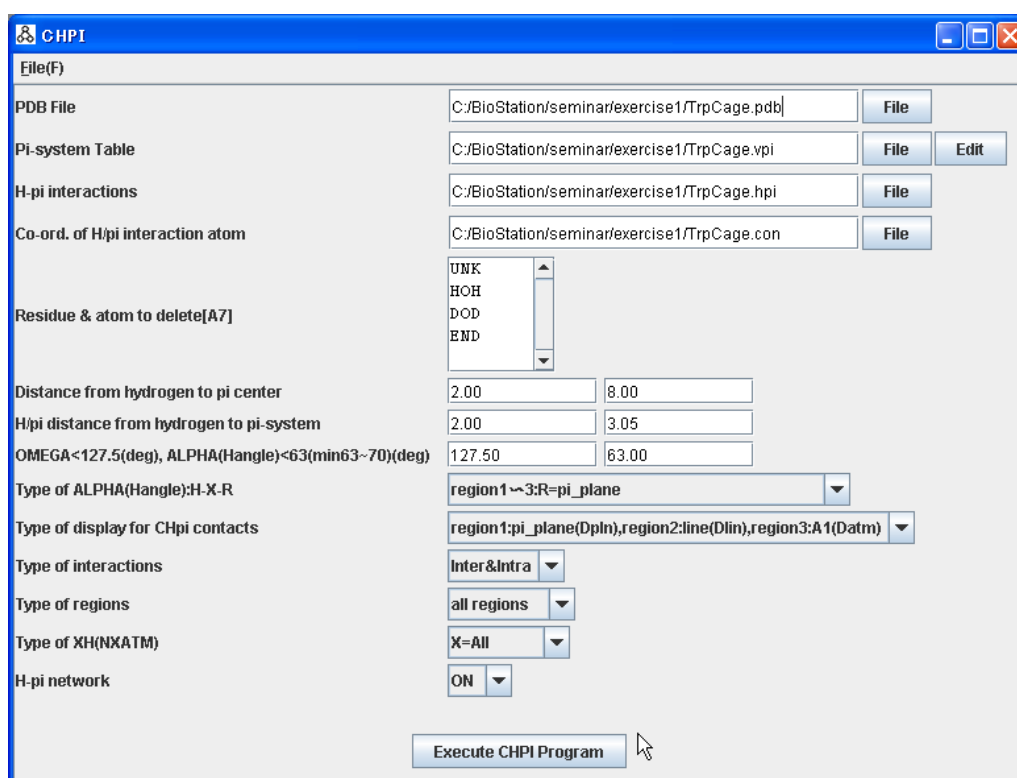
1.3 CHPI 解析

CHPI 解析を行うには **Tool**→**CHPI** を実行します。CHPI プログラムは西尾先生、梅沢先生が開発された **CH/π** 相互作用を解析するためのプログラムです。



Tool→**CHPI** を実行すると CHPI 解析のパラメータ設定を行うウィンドウが起動します。通常は変更する必要がないためここではデフォルト設定のまま **Execute CHPI Program** ボタンをクリックします。各パラメータの詳細については書籍「有機化学のための分子間力入門、西尾元宏、講談社サイエンティ

フィック」をご参照ください。



DOS プロンプトが起動し、CHPI プログラムの出力が表示されます。Please input exit と表示されれば完了です。exit コマンドを実行するか、ウィンドウの×ボタンをクリックして DOS プロンプトを閉じます。

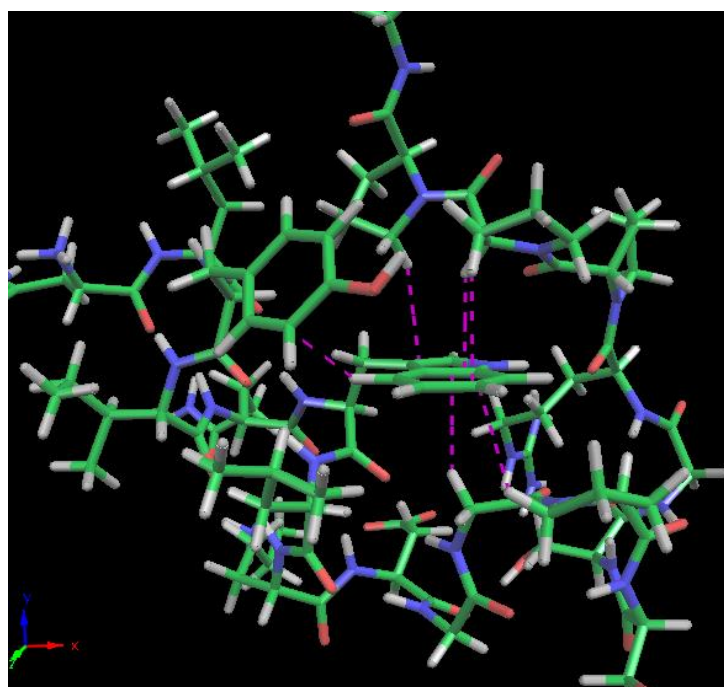
```
C:\WINDOWS\system32\cmd.exe
0:R=pi_plane(all regions)
1:R=pi_plane(region-1),R=line(region-2),R=C1(region-3)
2:R=C1(all regions)
:0
Type of display? 0:(pi_plane,line,C1) 1:C1, 2:pi_center
:0
Type of interactions? 0:intra&inter 1:inter 2:intra
:0
Type of regions?
0:all regions 1:region-1 2:region-2 3:region-3
:0
Type of XH? 0:ALL 1:C, 2:N, 3:O, 4:S, 5:except C
:0
H-pi network? 0:off 1:on
:1

**Inter&Intramolecular H/pi interactions**

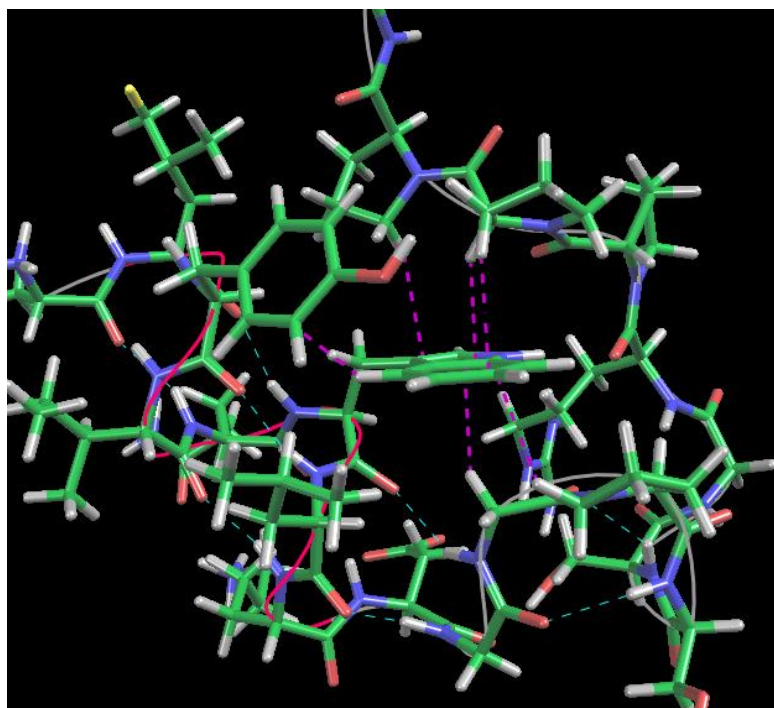
Num of H/pi interactions : 6 (region_1: 3, region_2: 2, region_3: 1)

Please input exit
C:\Program Files\Innovation\BioStationViewer15.pub>
```

以下のように CH/ π 相互作用がある箇所に紫の破線が表示されます。



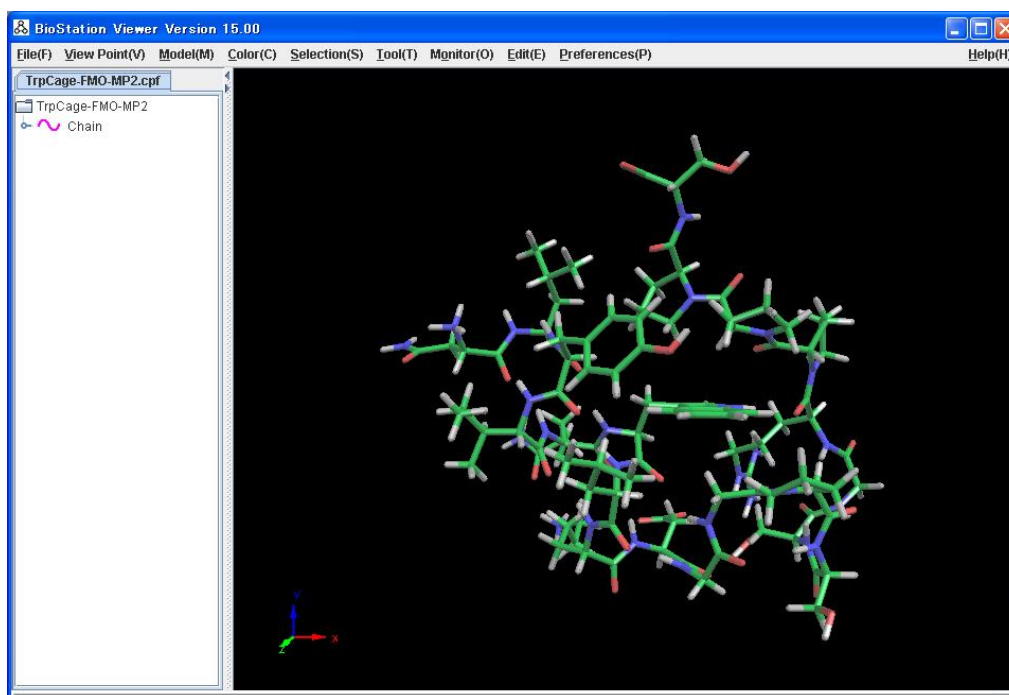
さらに、水素結合を表示してみます。Tool → Display H Bonds [all] を選択すると、水素結合の位置に水色の破線が表示されます。



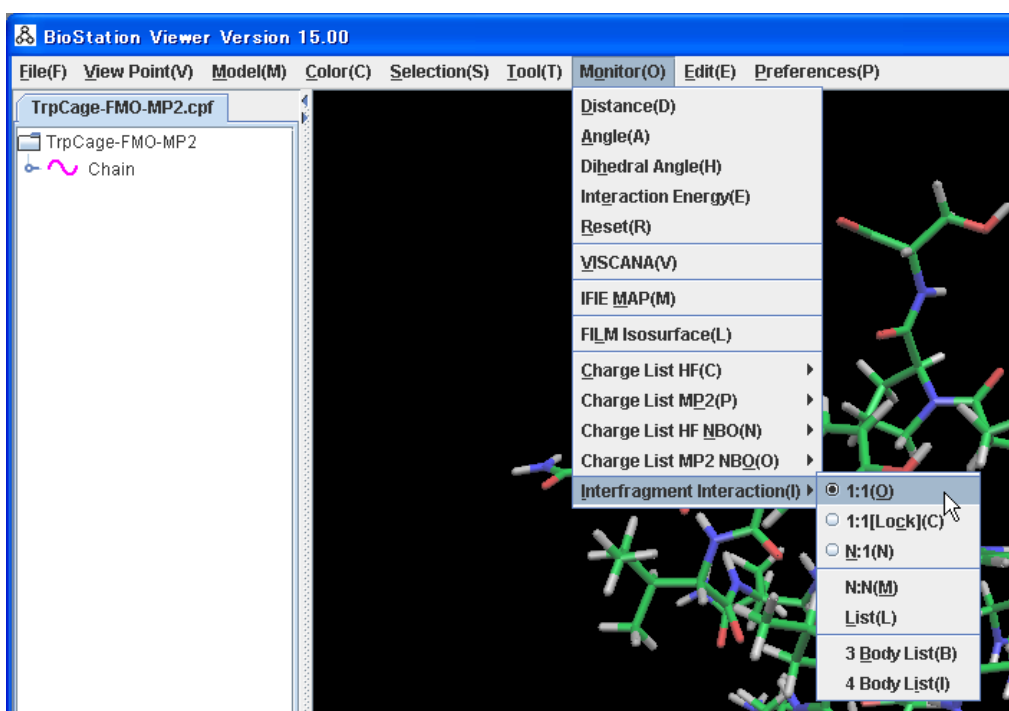
以上の CHPI 表示や水素結合表示は、PDB 立体構造から相互作用の候補位置を検索するツールです。実際に相互作用があるかどうかは、IFIE 解析をすることで定量的に解析することができます。

1.4 IFIE 解析

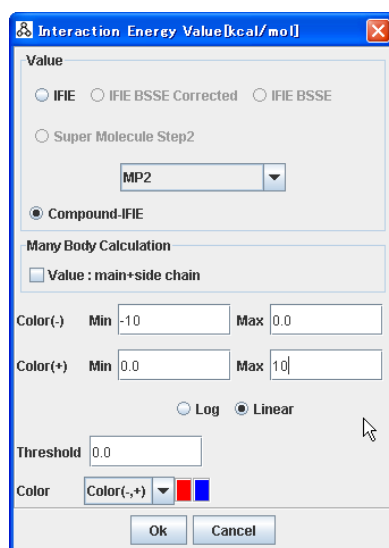
IFIE 解析を行います。まず、CPF ファイルを BioStation Viewer の画面にドラッグ&ドロップして読み込みます。



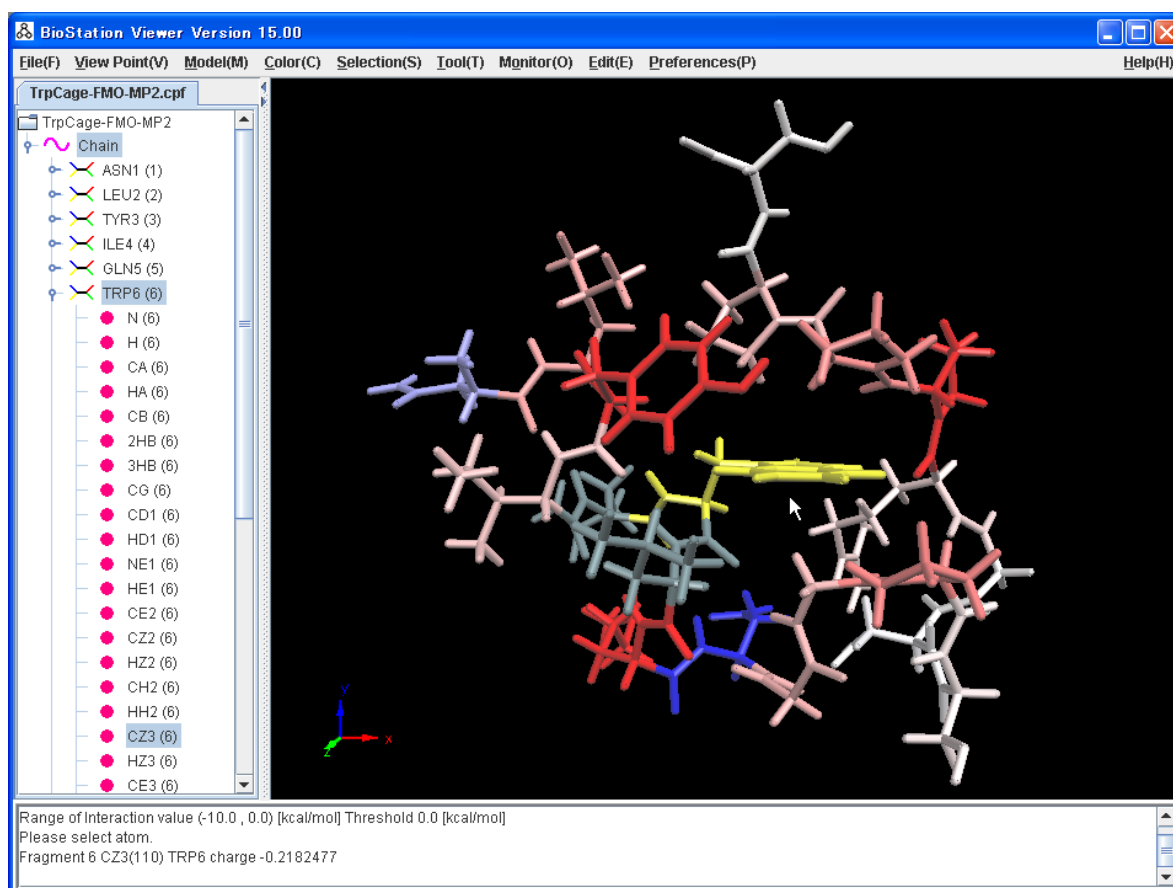
Monitor→Interfragment Interaction→1:1 を実行します。ここで IFIE 解析には 1:1、N:1、N:N などの選択肢がありますが、1:1 はフラグメント 1 対フラグメント 1 つの IFIE を解析します。注目する残基 (リガンドなど) が複数のフラグメントに分割されている場合は N:1 などを使うことがあります。タンパク質対 DNA の IFIE を見る場合などに N:N を使うことがあります。



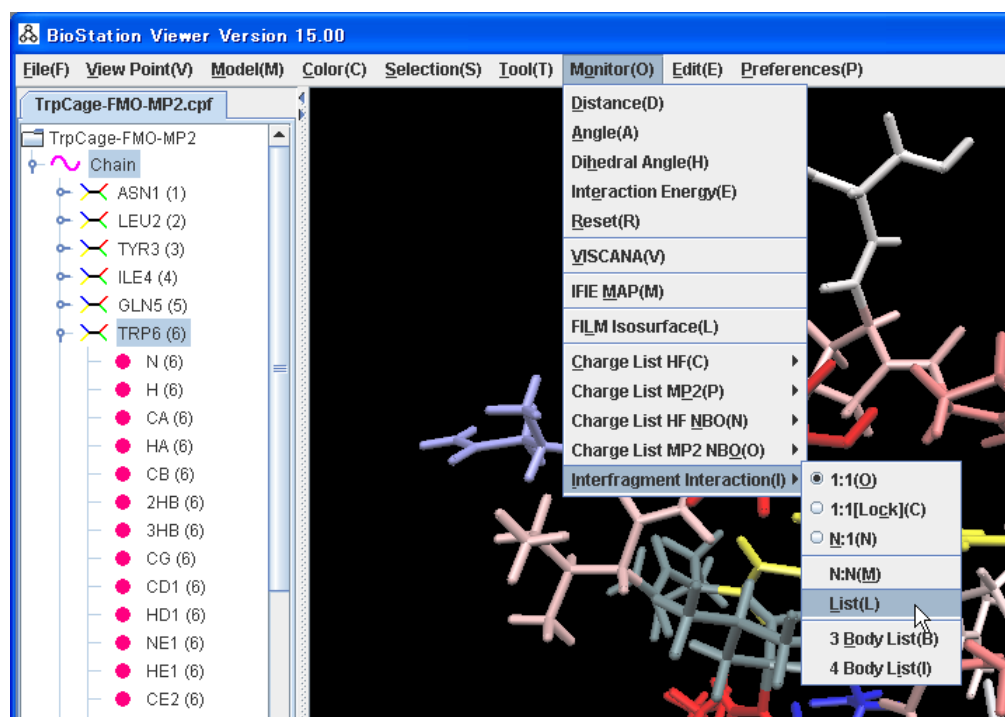
IFIE 解析のパラメータ設定ウィンドウが起動します。本課題では FMO-MP2 計算を行ったので Value のプルダウンは MP2 を選択します。Color のテキストボックスでは IFIE を青赤のグラデーションで表示する際の上限值と下限値を指定します。ここでは -10 から 10 とします。



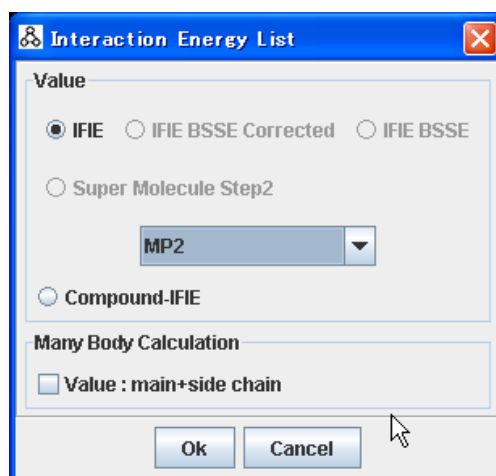
OK ボタンをクリックし、IFIE 解析したいフラグメントをクリックすると、そのフラグメントとの IFIE に基づいて周囲のフラグメントが色付けされます。黄色は現在注目しているフラグメント、赤は注目しているフラグメントと引力的な相互作用をしているフラグメント、青は注目しているフラグメントと斥力的な相互作用をしているフラグメント、灰色はそのフラグメントと共有結合しているため IFIE を評価できないフラグメントを意味します。



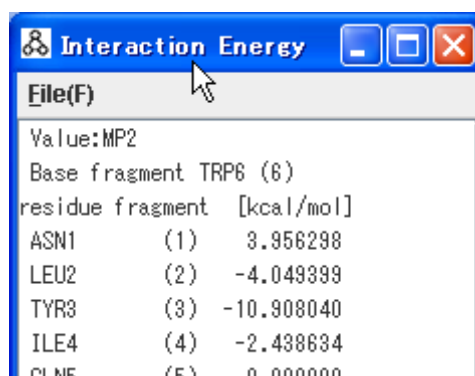
IFIE の数値を表示する場合には Monitor→Interfragment Interaction→List を実行します。



本課題では MP2 レベルの IFIE を表示します。



Monitor→Interfragment Interaction→List を実行すると注目しているフラグメントとその周囲のフラグメント間の IFIE が kcal/mol 単位で表示されます。



2 課題 2 : エストロゲン受容体ーリガンド複合体の IFIE 解析

本課題ではエストロゲン受容体 (EST) とそのリガンド (エストロゲン; EST) 複合体の FMO-MP2 計算を行い、IFIE 解析を行います。ここで構造は 50 残基にモデル化した構造を用います。

2.1 入力データ作成

課題 2 では課題 1 で作成した AJF ファイルを編集して入力データを作成します。まず、課題 1 で作成した AJF ファイルを別名でコピーします。

```
cp TrpCage-FMO-MP2.ajf ER_50res-FMO-MP2.ajf
```

ER_50res-FMO-MP2.ajf を編集します。

```
vi ER_50res-FMO-MP2.ajf
```

CNTRL ネームリストの ReadGeom キーワードと WriteGeom キーワードを変更します。

```
&CNTRL
...
ReadGeom='ER_50res.pdb'
WriteGeom='ER_50res-FMO-MP2.cpf'
...
/
```

以上で入力データの作成は完了です。

2.2 FMO 計算

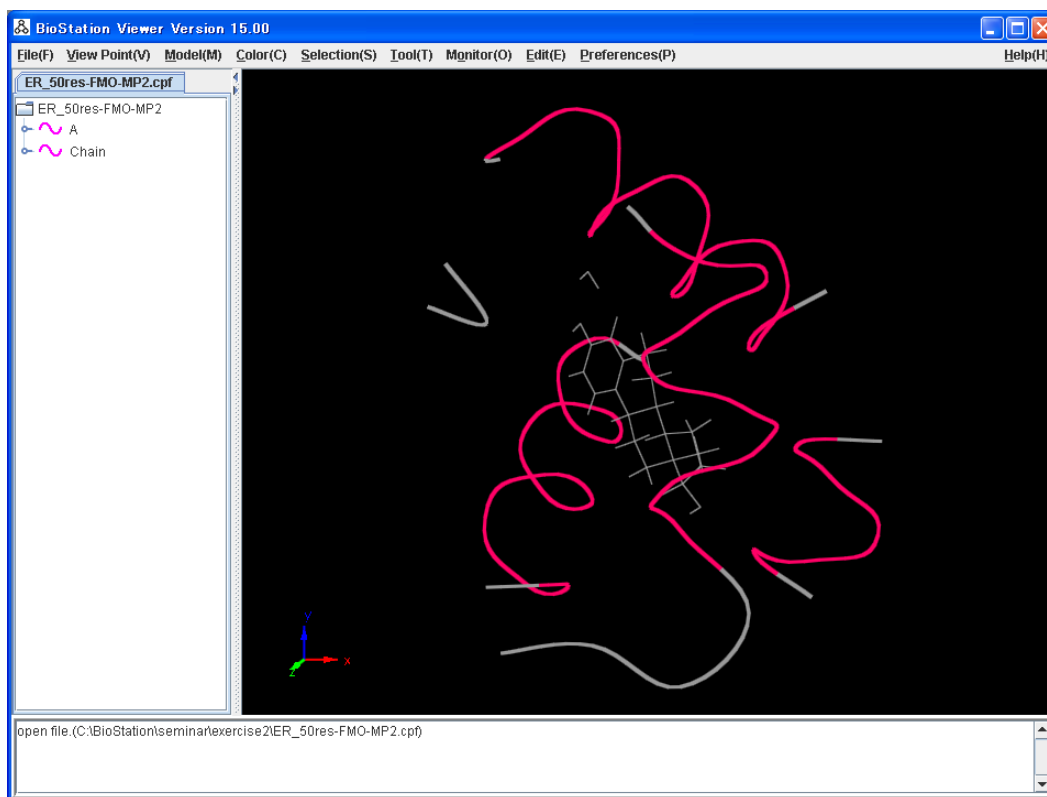
FMO 計算の実行方法は課題 1 の時と同じです。例えば 48 プロセスの並列計算を実行する場合は以下のように ABINIT-MP を実行します。

```
mpirun -n 48 abinitmp < ER_50res-FMO-MP2.ajf >& ER_50res-FMO-MP2.log &
```

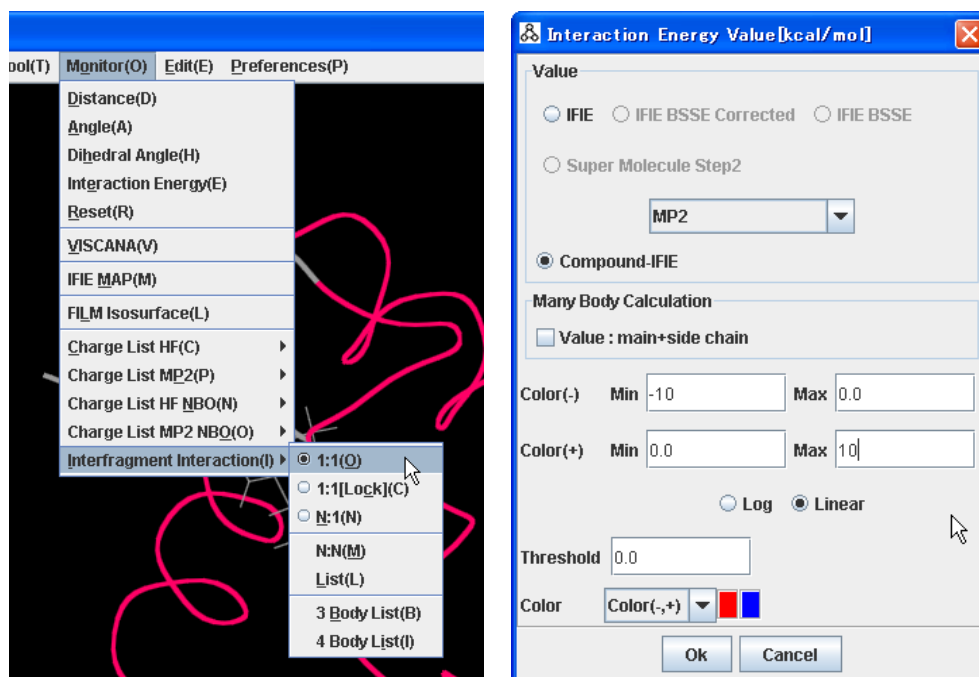
計算が完了すると ER_50res-FMO-MP2.log と ER_50res-FMO-MP2.cpf が出力されるのでこれらのファイルをダウンロードします。

2.3 IFIE 解析

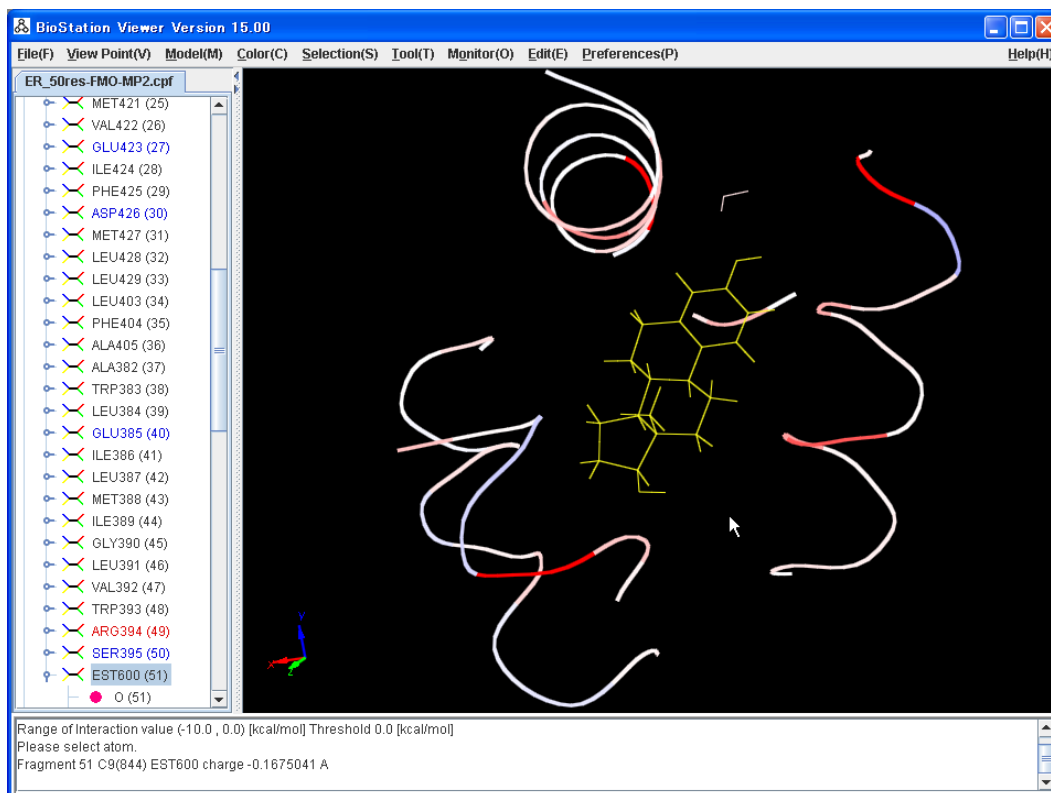
CPF ファイルを BioStation Viewer の画面にドラッグ&ドロップして読み込みます。



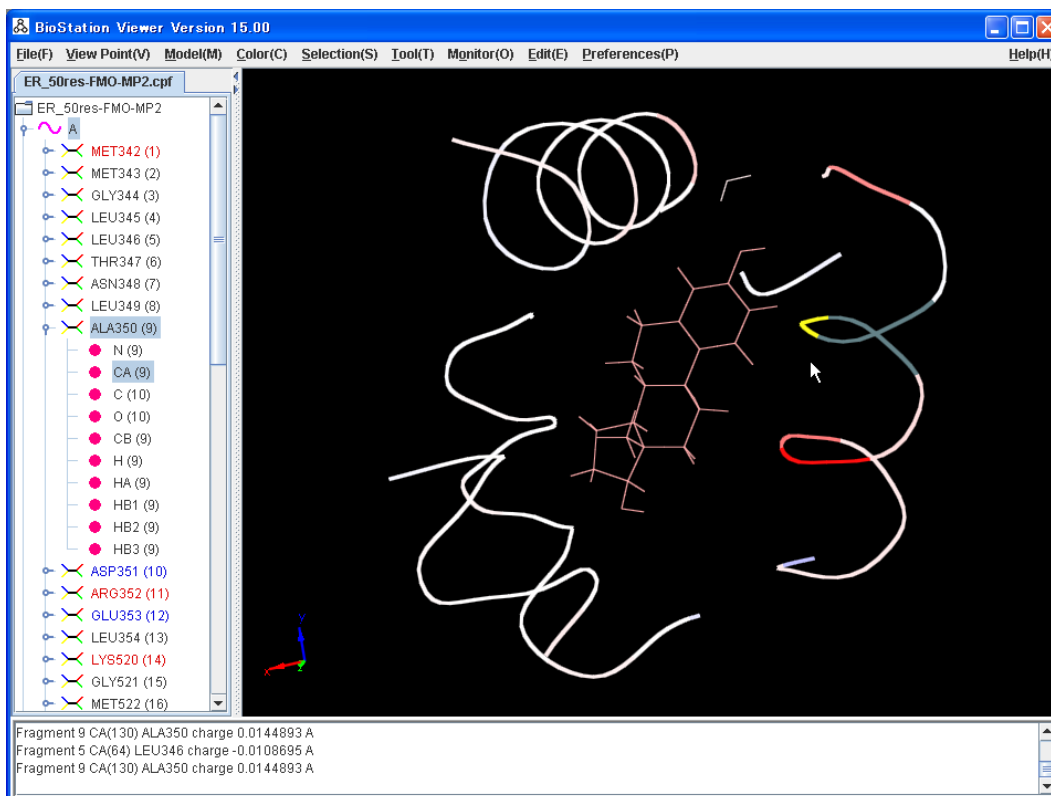
リガンドをクリックし、Monitor→Interfragment Interaction→1:1 を実行します。Value のプルダウンは MP2 を選択し、Color のテキストボックスでは -10 から 10 とします。



タンパク質の立体構造がリガンドとの IFIE に基づいて色付けされます。

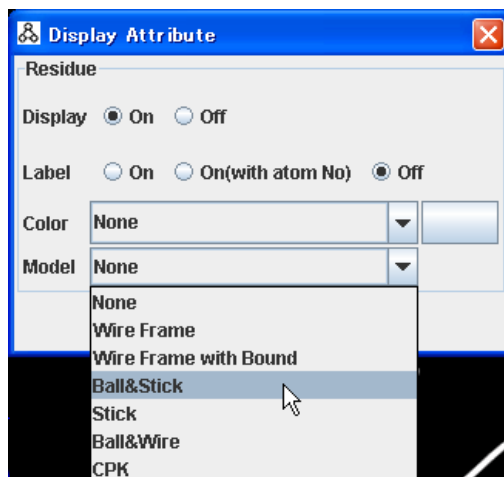


リガンドではなく、アミノ酸をクリックすれば、そのアミノ酸との IFIE に基づいて周囲の残基を色付けすることができます。ここでクリックした ALA350 を Ball&Stick 表示にしてみましょう。

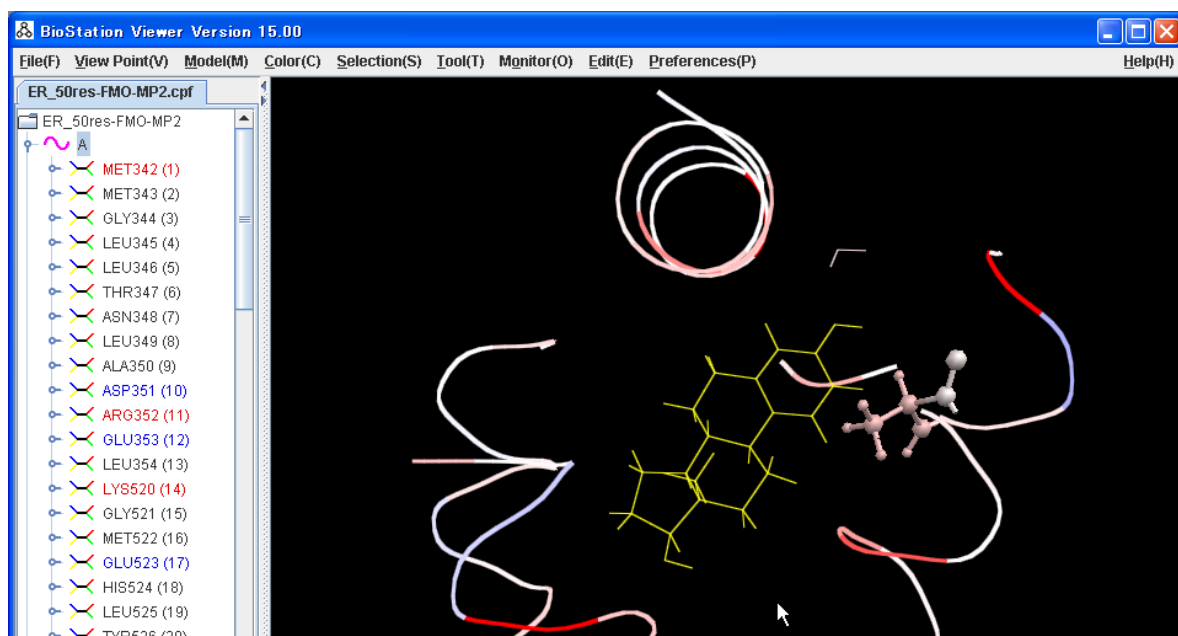


画面左のツリー構造にて ALA350 を右クリックし、Display Attribute ウィンドウで Model を

Ball&Stick にします。



再びリガンドに焦点を戻すと、リガンドと ALA350 が相互作用する様子を分子構造と IFIE を照らし合わせて見ることができます。



また、Monitor→Interfragment Interaction→List を実行すると注目しているフラグメントとその周囲のフラグメント間の IFIE が kcal/mol 単位で表示されます。

Base fragment	residue fragment	[kcal/mol]
EST600 (51)		
MET342	(1)	0.053758
MET343	(2)	-0.962543
GLY344	(3)	-0.640144
LEU345	(4)	-0.303180
LEU346	(5)	-3.667930

3 課題 3 : HIV-1 プロテアーゼー阻害剤の複合体計算のための手動フラグメント分割

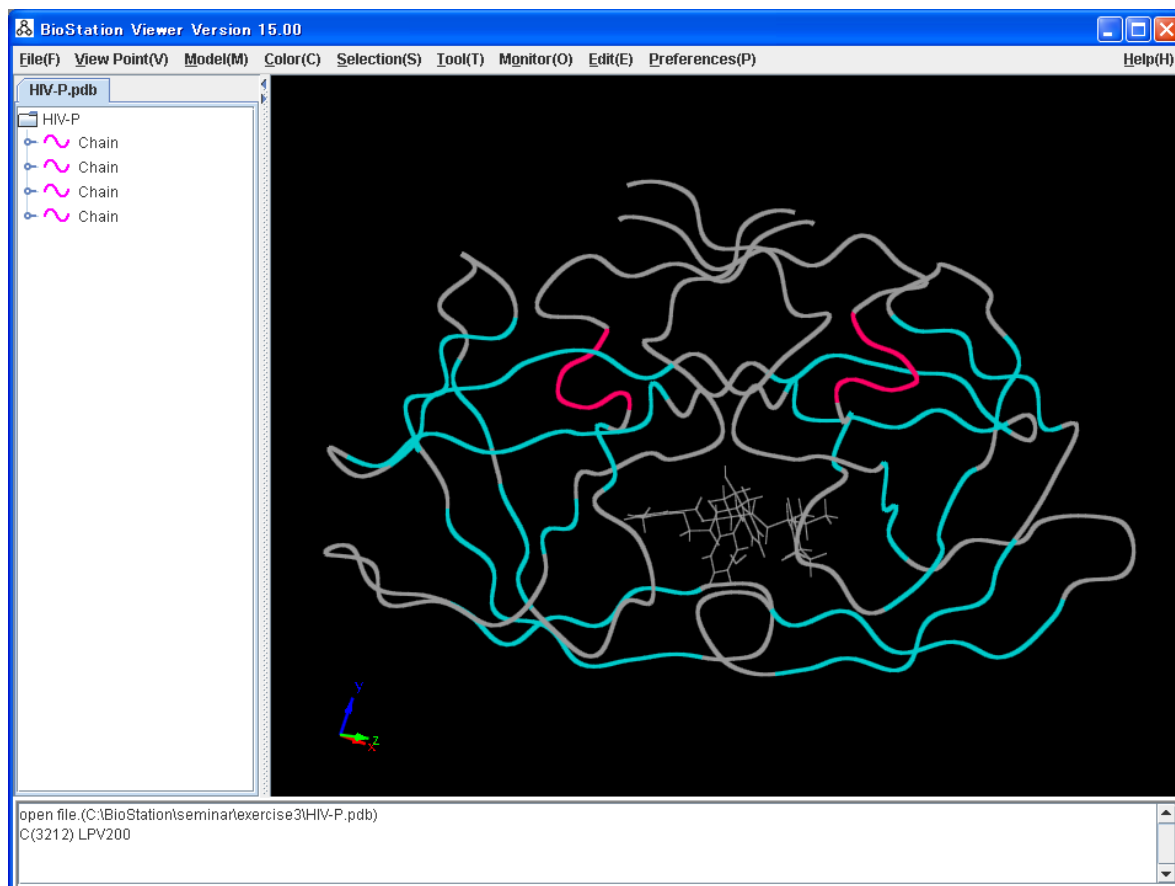
本課題では HIV-1 プロテアーゼとその阻害剤 (ロピナビル) の複合体の FMO-MP2 計算を行い、IFIE 解析を行います。ここでロピナビルはサイズが大きいリガンドなので 4 つのフラグメントに手動で分割して計算します。

3.1 入力データ作成

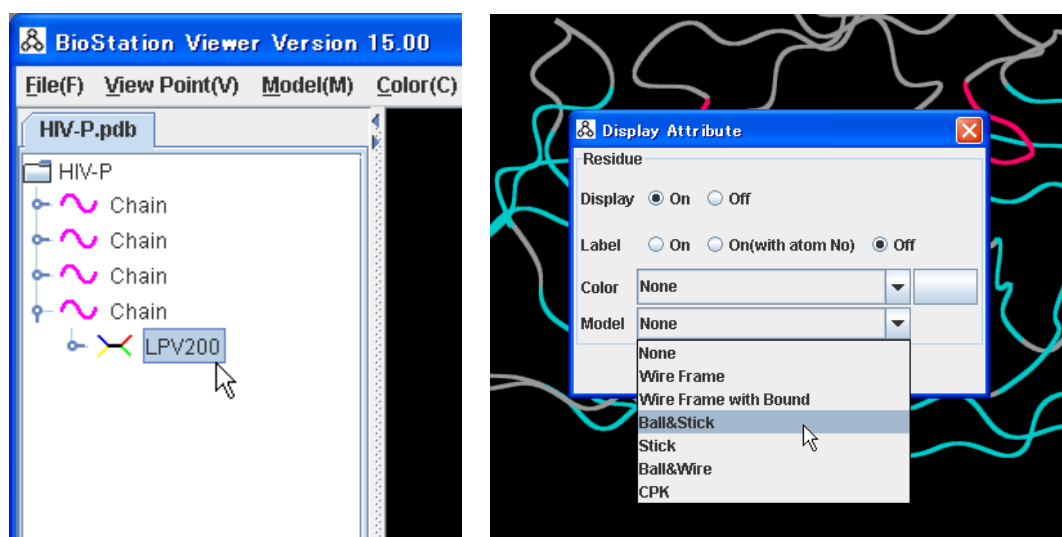
HIV-1 プロテアーゼー阻害剤の複合体構造を BioStation Viwer 読み込みます。HIV-1 プロテアーゼー阻害剤の複合体構造は以下のフォルダに格納されています。

C:\BioStation\seminar\exercise3\HIV-P.pdb

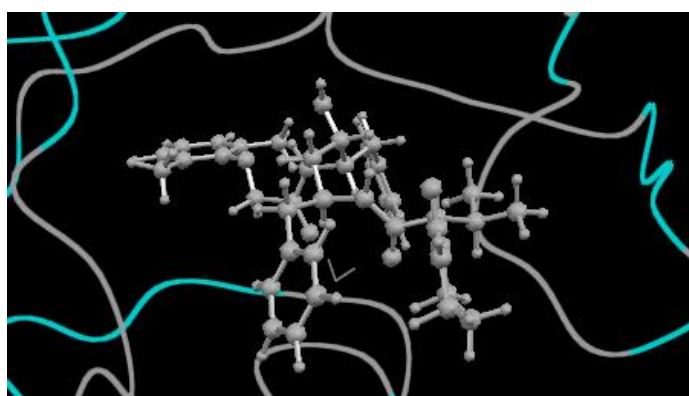
読み込んだ構造は以下のように表示されます。



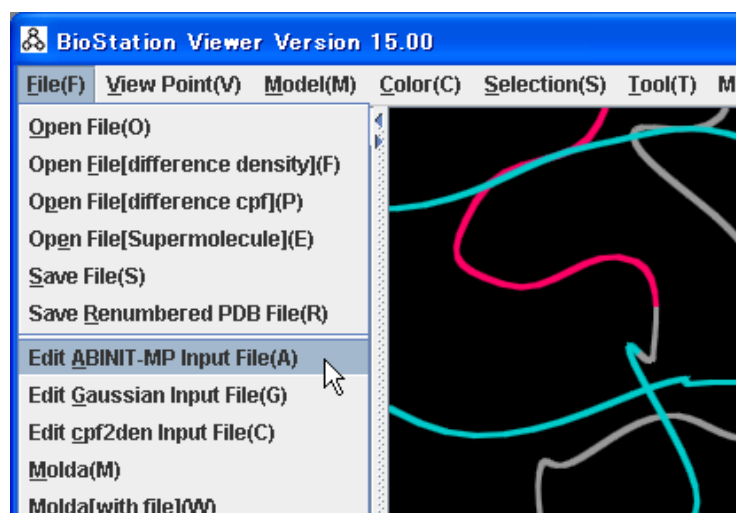
ロピナビルのみ Ball&Stick 表示にします。BioStation Viewer の画面左のツリー表示から LPV200 を右クリックし、Model を Ball&Stick にします。



ロピナビルのみ Ball&Stick 表示になります。

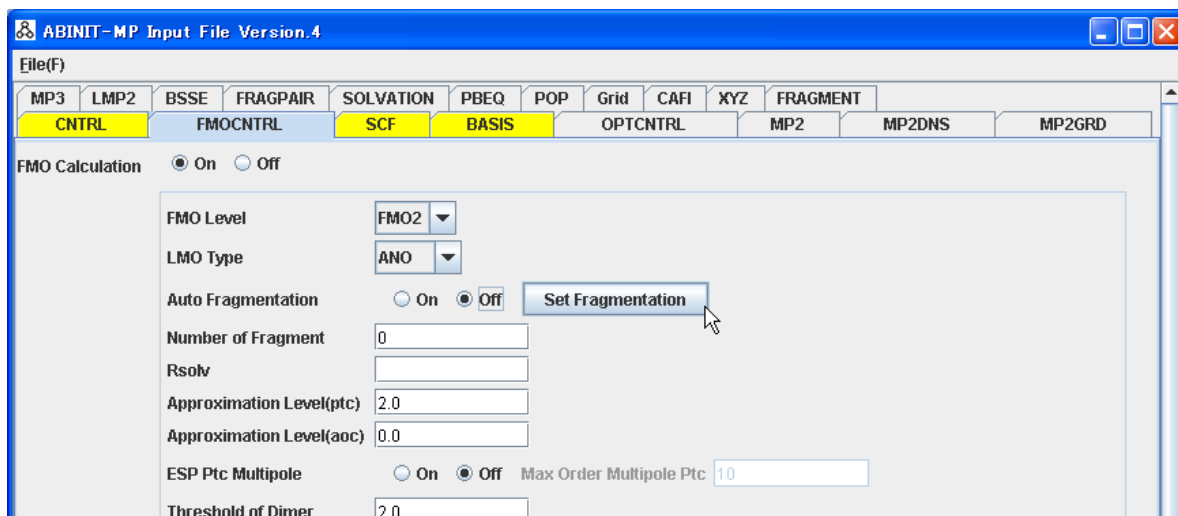


File→Edit ABINIT-MP Input File を実行し、入力ファイルを作成していきます。

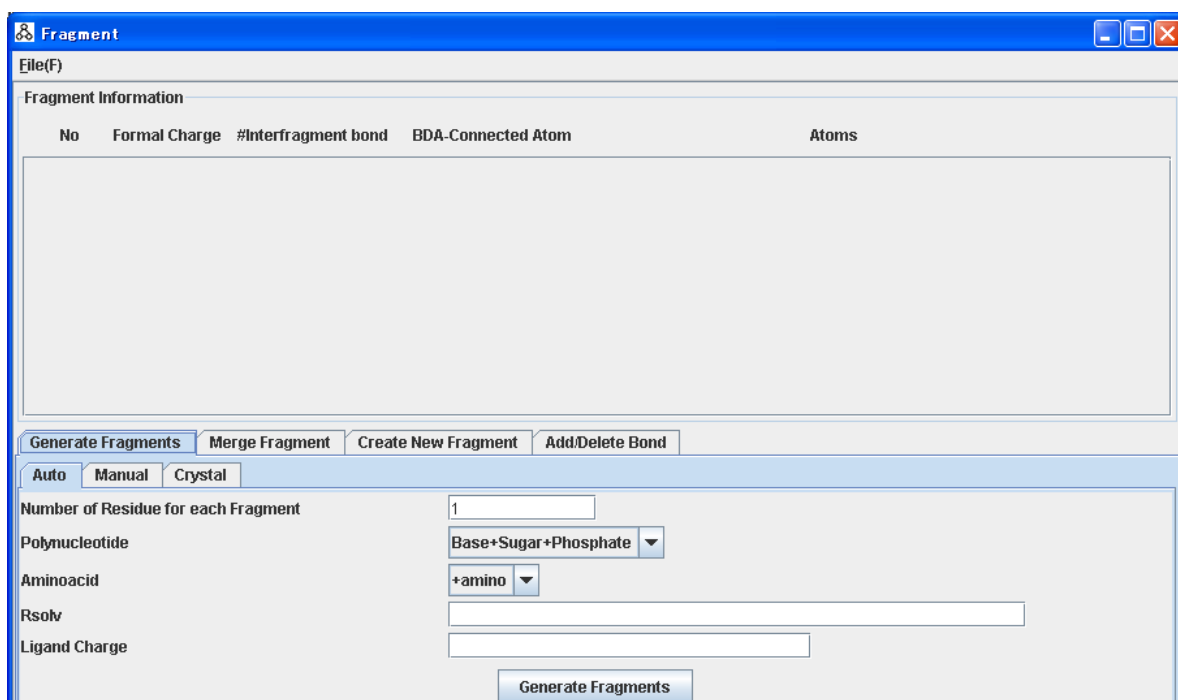


課題 1 と同様、CNTRL タブの Method を MP2 に変更し、ReadGeom や WriteGeom を入力します。

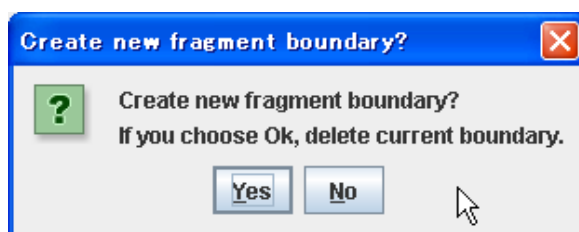
本課題ではフラグメントを手動で分割します。まず、FMOCNTRL タブの Auto Fragmentation を Off にし、Set Fragmentation ボタンをクリックします。



Fragment ウィンドウが起動します。まず、Generate Fragments ボタンをクリックし、タンパク質部分を自動でフラグメント分割します。



確認メッセージが表示されますので、Yes をクリックします。



DOS プロンプトが立ち上がり、フラグメント分割が実行されます。実行が完了したら **exit** と入力するかウィンドウの×ボタンをクリックして DOS プロンプトを閉じます。

```

C:\WINDOWS\system32\cmd.exe
192 3009 3022
193 3026 3041
194 3045 3048
195 3052 3059
196 3063 3073
197 3077 3092
198 3096 3106

## Memory allocation report (in bytes)
Rank = 0
Reserved memory / node = 104857600
Max. allocated memory = 0
Non-deallocated memory = 0

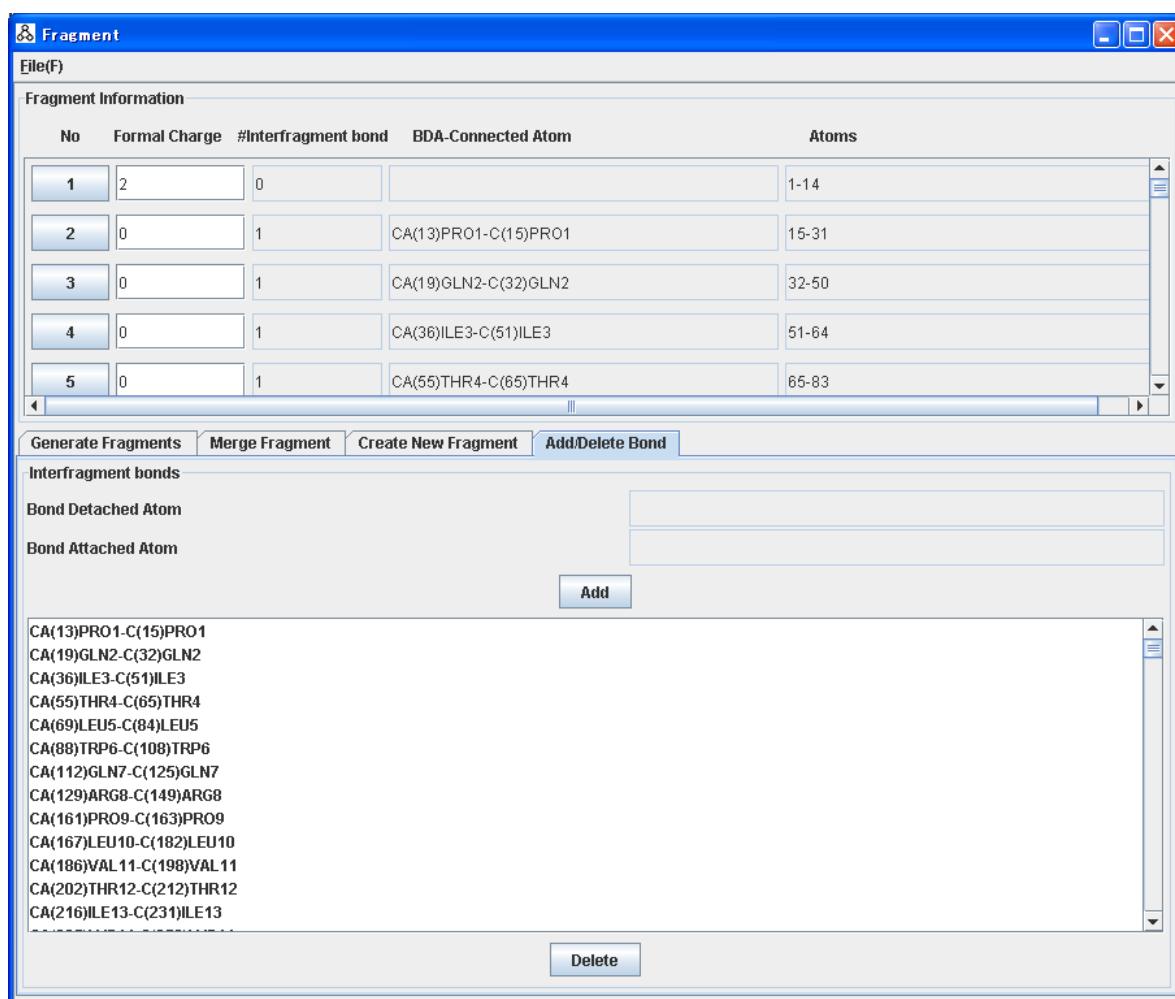
-----
ABINIT-MP DONE
-----
2013/03/15 17:56:55

Please input exit

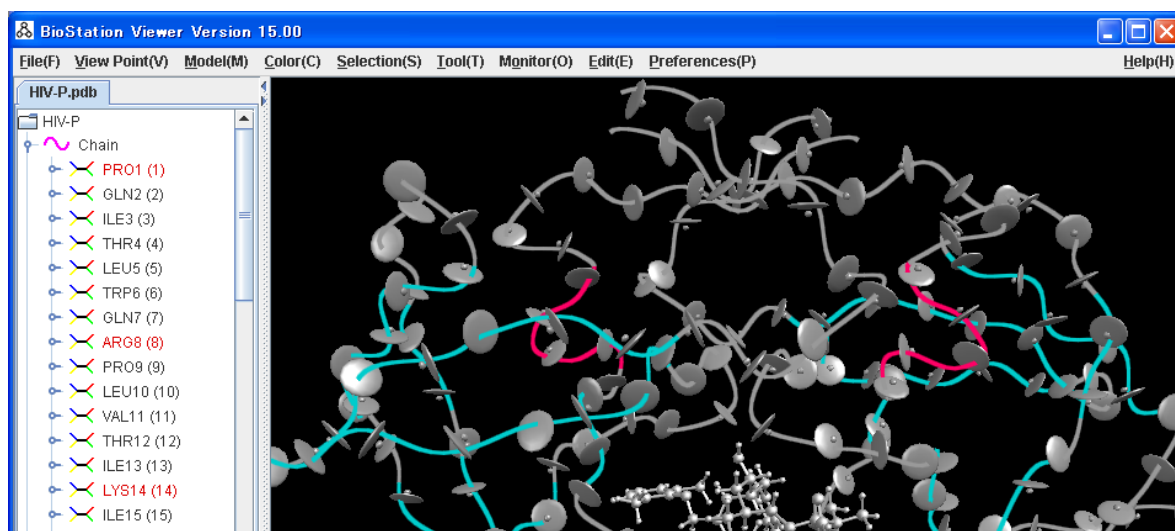
C:\Program Files\Innovation\BioStationViewer15.pub>

```

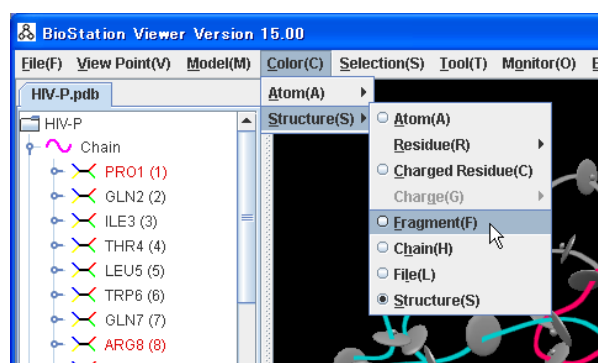
Fragment ウィンドウにフラグメント分割後の情報が反映されます。



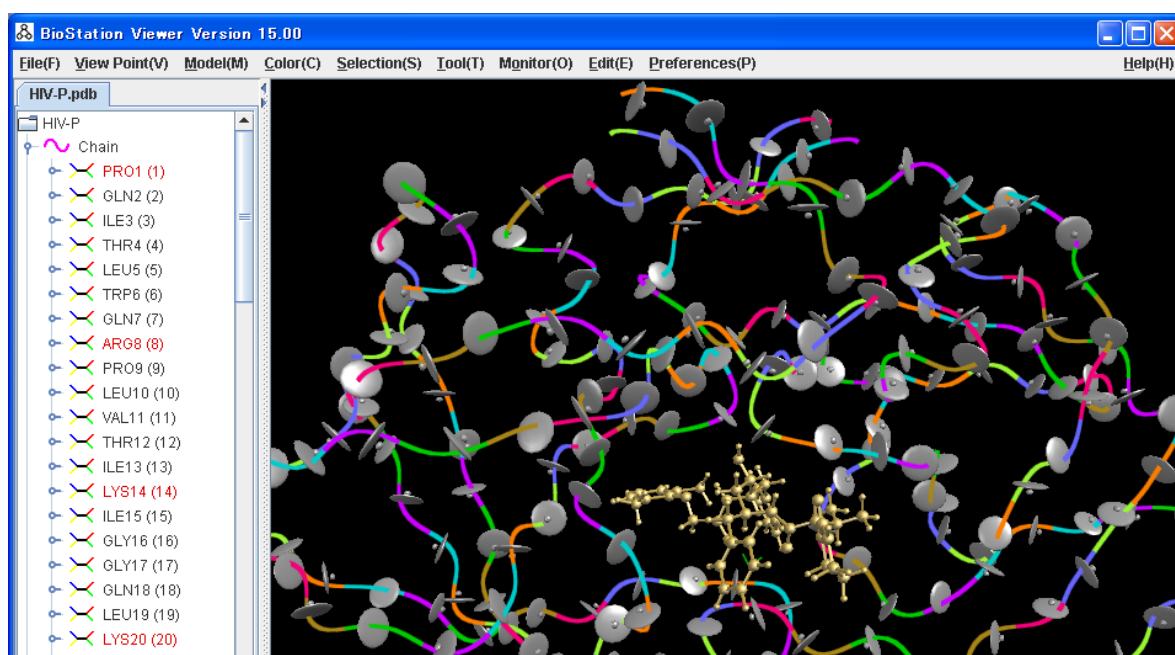
構造画面においてはフラグメント分割箇所に分割を表す円盤が表示されます。



Color→Structure→Fragment を実行し、フラグメントごとに異なる色で表示します。

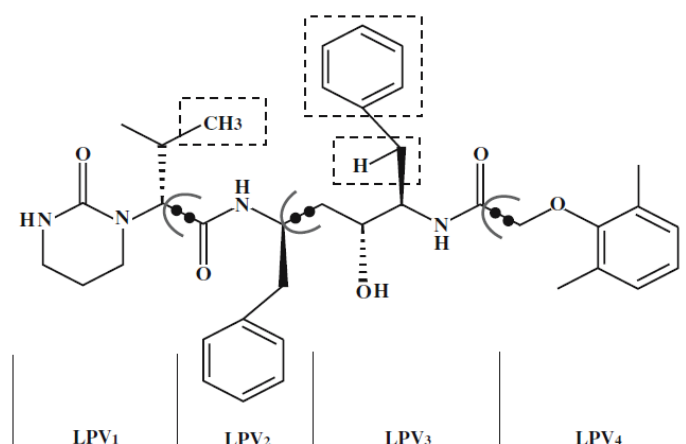


フラグメントがそれぞれ異なる色で表示されます。



ここでロピナビルは自動ではフラグメント分割されないため単色で表示されます。

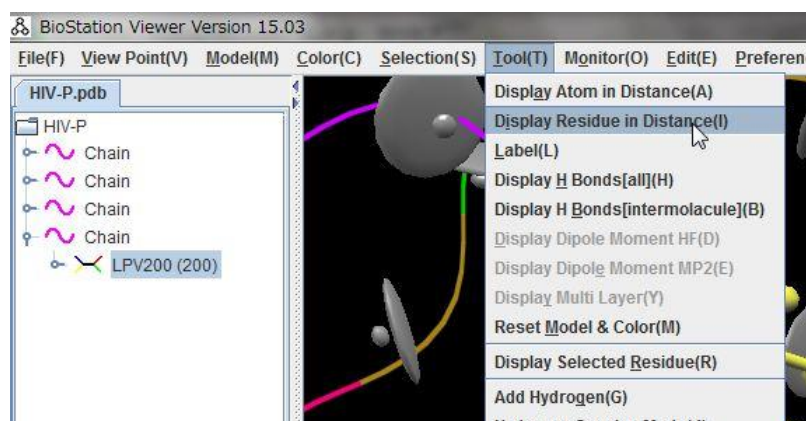
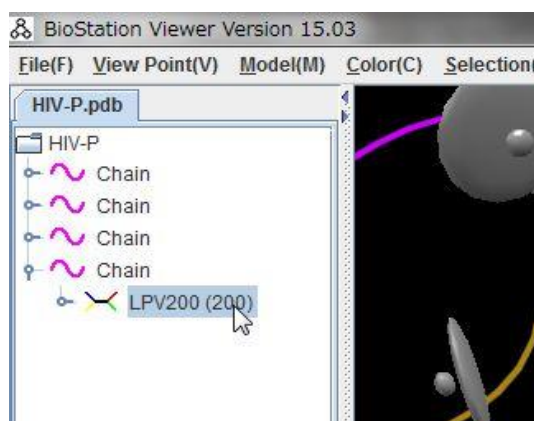
ロピナビルを以下のように LPV₁～LPV₄ の 4 つのフラグメントに分割します。



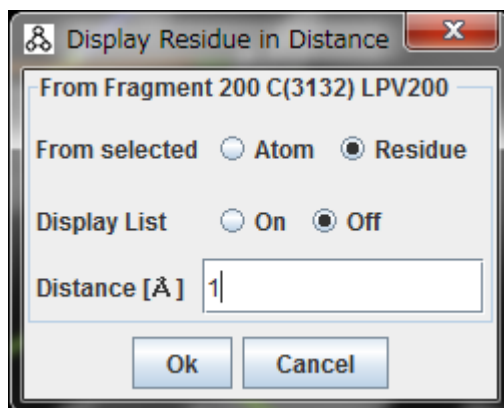
T. Ishikawa, et al., Theo.Chem.Acc., 118 (2007) 937 より

ロピナビルを手動分割する際に、周辺のタンパク質の構造表示されたままだと操作が難しいため、ロピナビルのみを画面上に表示してから、フラグメント分割を行います。

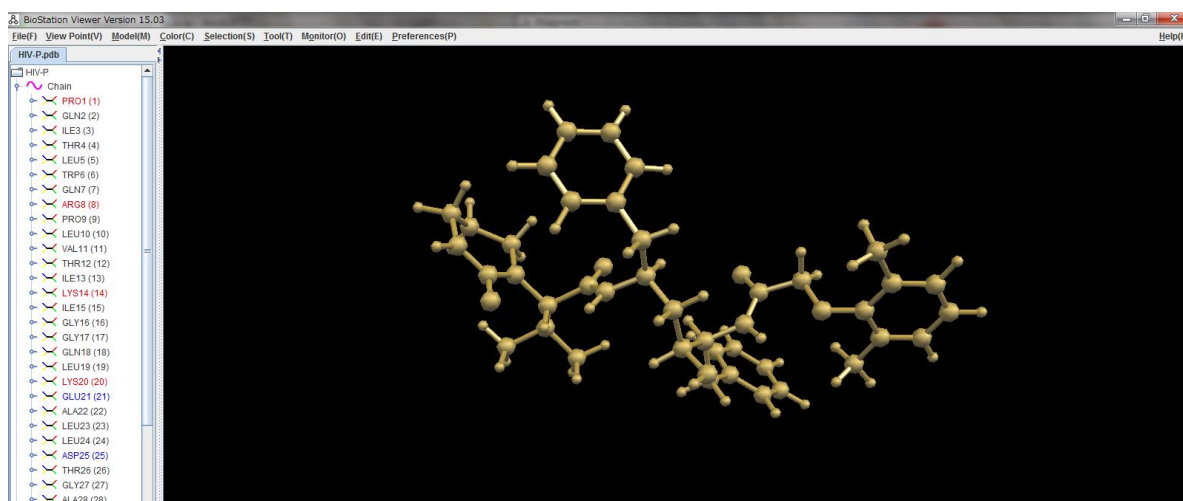
まず、ロピナビルを選択します。Tool→Display Residue in Distance を実行します。



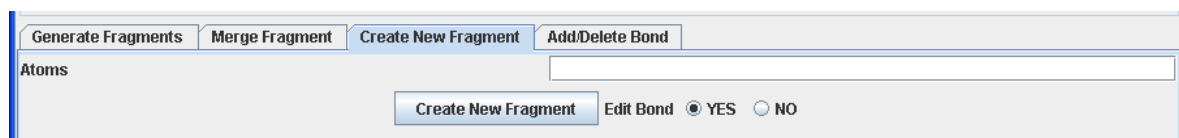
Tool→Display Residue in Distance を実行すると、選択した残基から、指定した距離の範囲内に存在する残基のみを画面上に表示する設定を行うウィンドウが起動します。ここでは、ロピナビルのみを表示したいため、Residue を選択し、画面上に表示する残基の距離はロピナビルから 1Å以内とし OK ボタンで実行します。ロピナビルから 1Å以内に位置する残基は存在しないため、ロピナビルのみが表示されます。



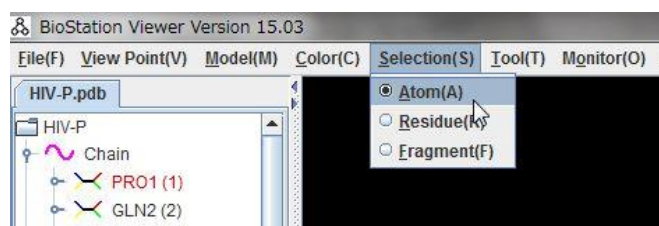
以下のように、ロピナビルのみ表示されます。



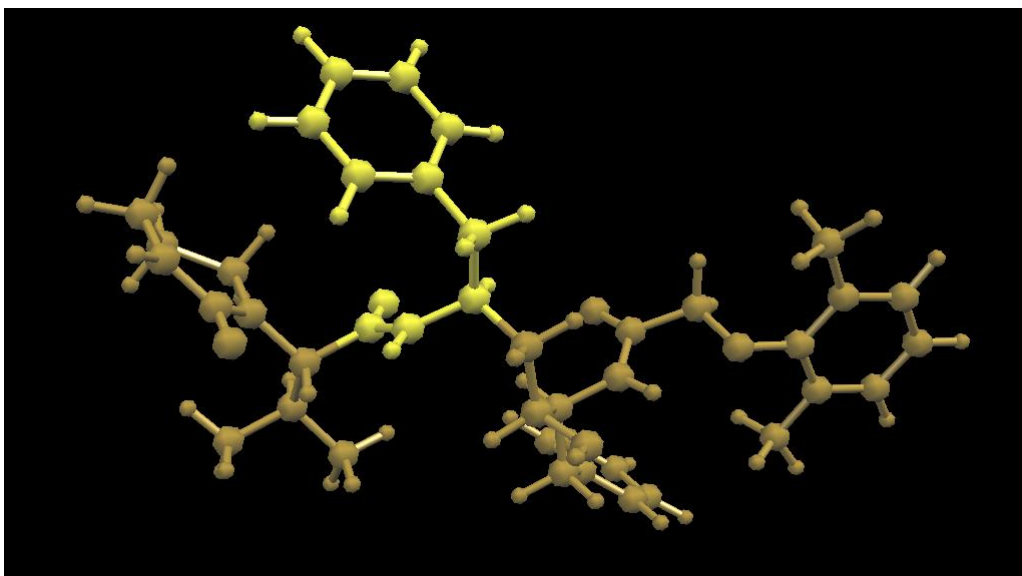
次に、ロピナビルのフラグメント分割を行います。フラグメントを新規に定義するには **Fragment** ウィンドウの **Create New Fragment** タブのテキストボックスをクリックします。この状態で構造画面の原子をクリックするとその原子の通し番号がこのテキストボックスに格納され、その状態で **Create New Fragment** ボタンをクリックするとそれらの原子から成るフラグメントが作成されます。



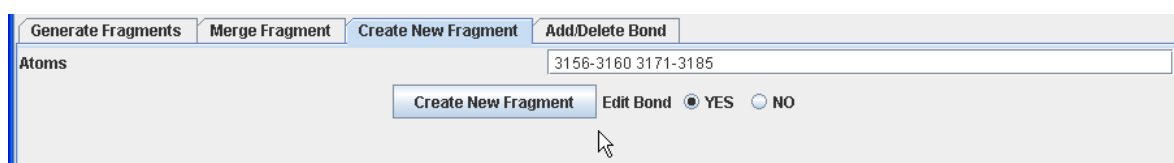
構造画面の原子の選択する前に Selection→Atom を実行します。



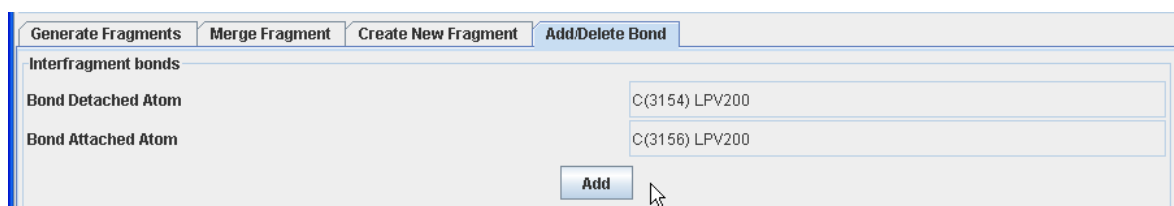
LPV₂フラグメントに含まれる原子を1つずつ Ctrl ボタンを押しながら選択していきます。選択された原子は、黄色で表示されます。



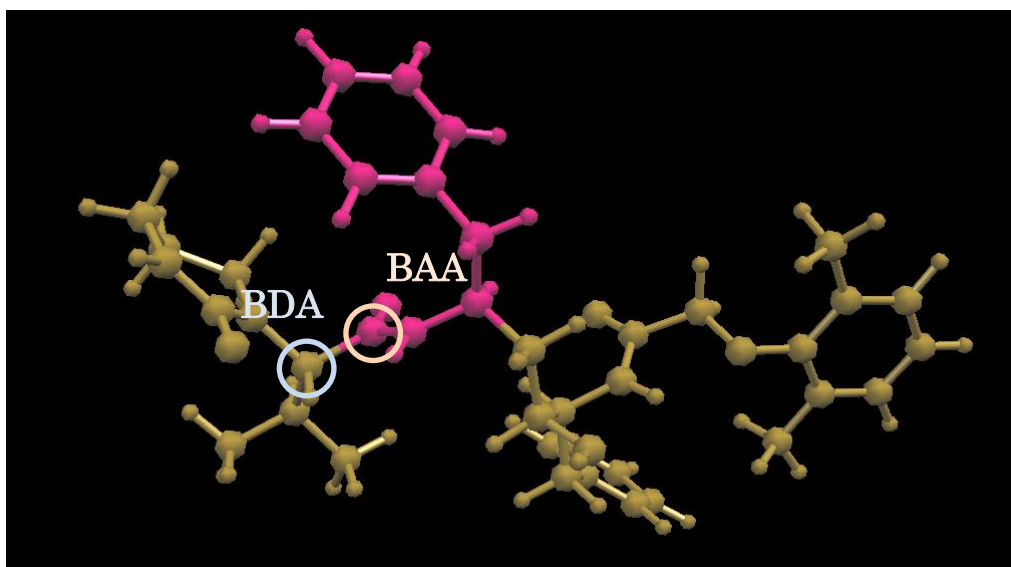
選択が完了すると Create New Fragment タブのテキストボックスには「3156-3160 3171-3185」が入力されています。この状態で Create New Fragment ボタンを実行します。



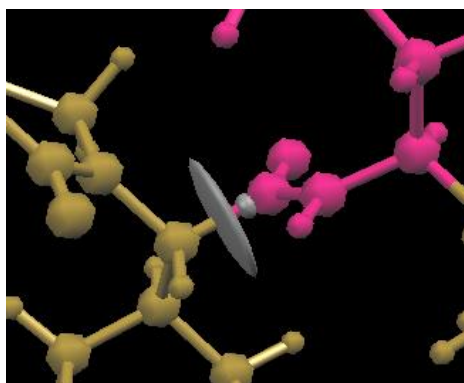
Create New Fragment ボタンを実行すると新規にフラグメントが作成されます。同時に Add/Delete Bond タブに切り替わり、新しいフラグメントの境界部分の Bond Detached Atom (BDA) と Bond Attached Atom (BAA) を入力するように求められます。



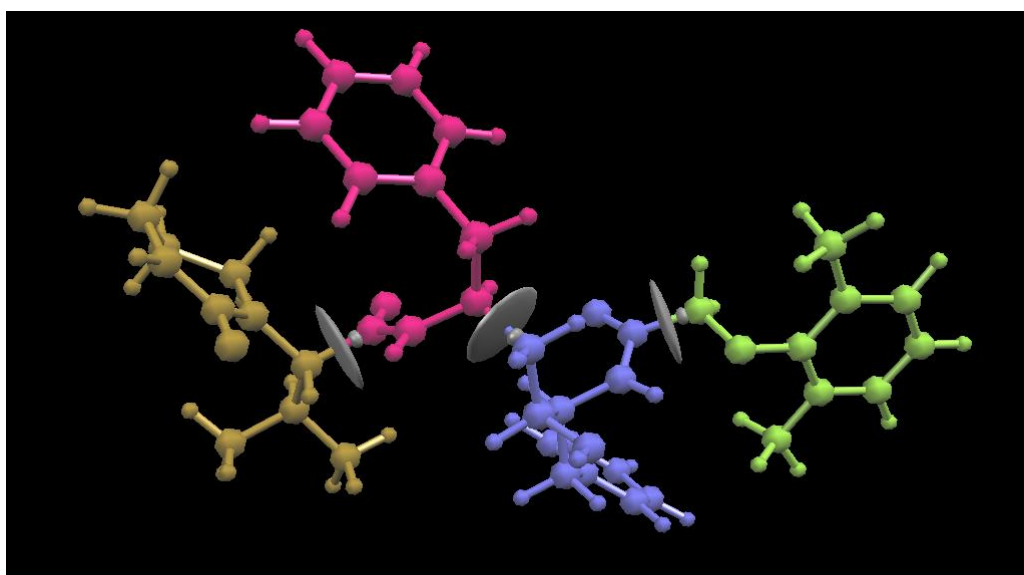
以下の原子を BDA と BAA として選択し、Add ボタンをクリックします。



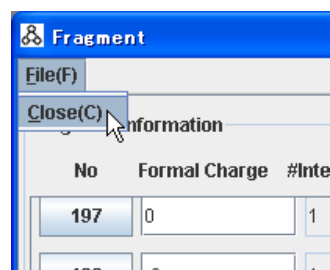
フラグメント境界に円盤が表示されます。BAA 側に電子対を表す小さな球が表示されます。



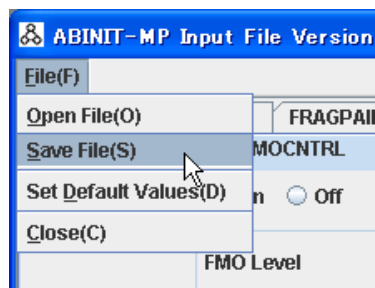
このような操作をロピナビルが以下のように分割されるまで実行します。



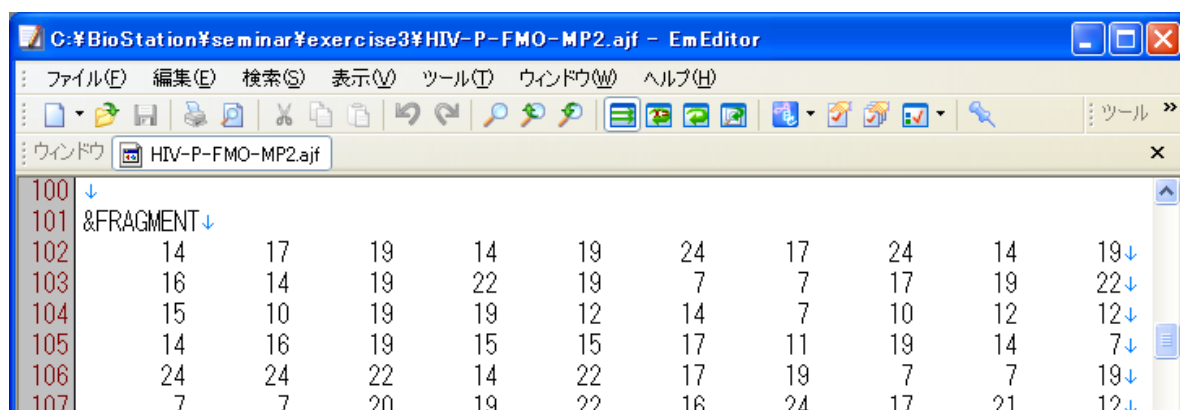
フラグメント分割が完了したら **Fragment** ウィンドウを閉じます。



File→Save File を実行して AJF ファイルを保存します。



AJF ファイルをテキストエディタで開くと **FRAGMENT** ネームリストにフラグメント分割情報が含まれていることがわかります。また **FMOCTRL** ネームリストの **AutoFrag** は **OFF** になっています。



3.2 FMO 計算

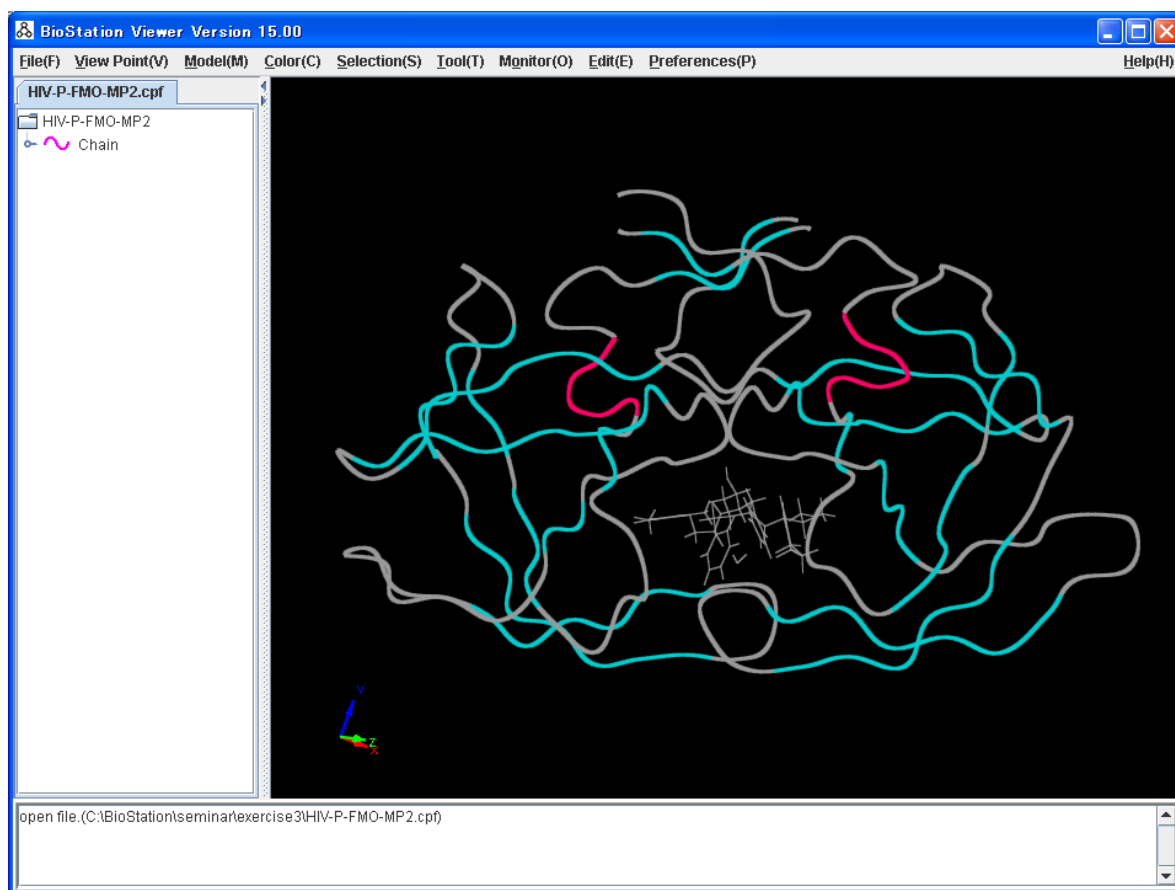
FMO 計算の実行方法はこれまでの課題の時と同じです。例えば 48 プロセスの並列計算を実行する場合は以下のように ABINIT-MP を実行します。

```
mpirun -n 48 abinitmp < HIV-P-FMO-MP2.ajf >& HIV-P-FMO-MP2.log &
```

計算が完了すると HIV-P-FMO-MP2.log と HIV-P-FMO-MP2.cpf が出力されるのでこれらのファイルをダウンロードします。

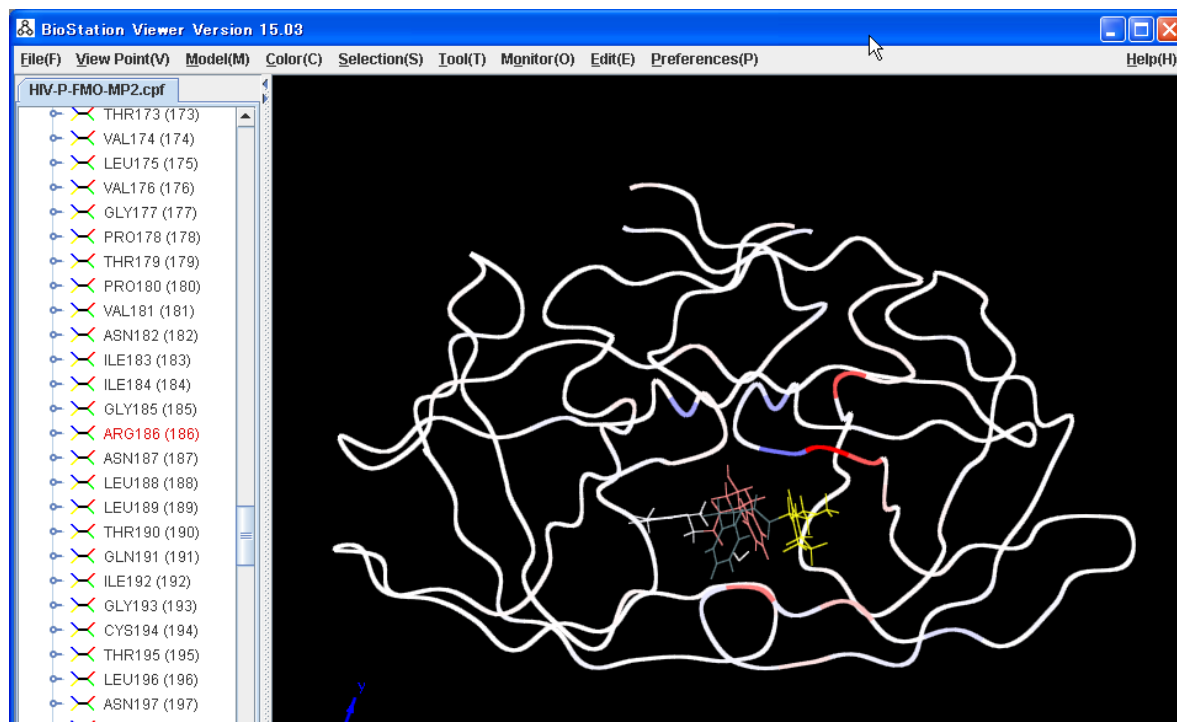
3.3 IFIE 解析

CPF ファイルを BioStation Viewer の画面にドラッグ&ドロップして読み込みます。

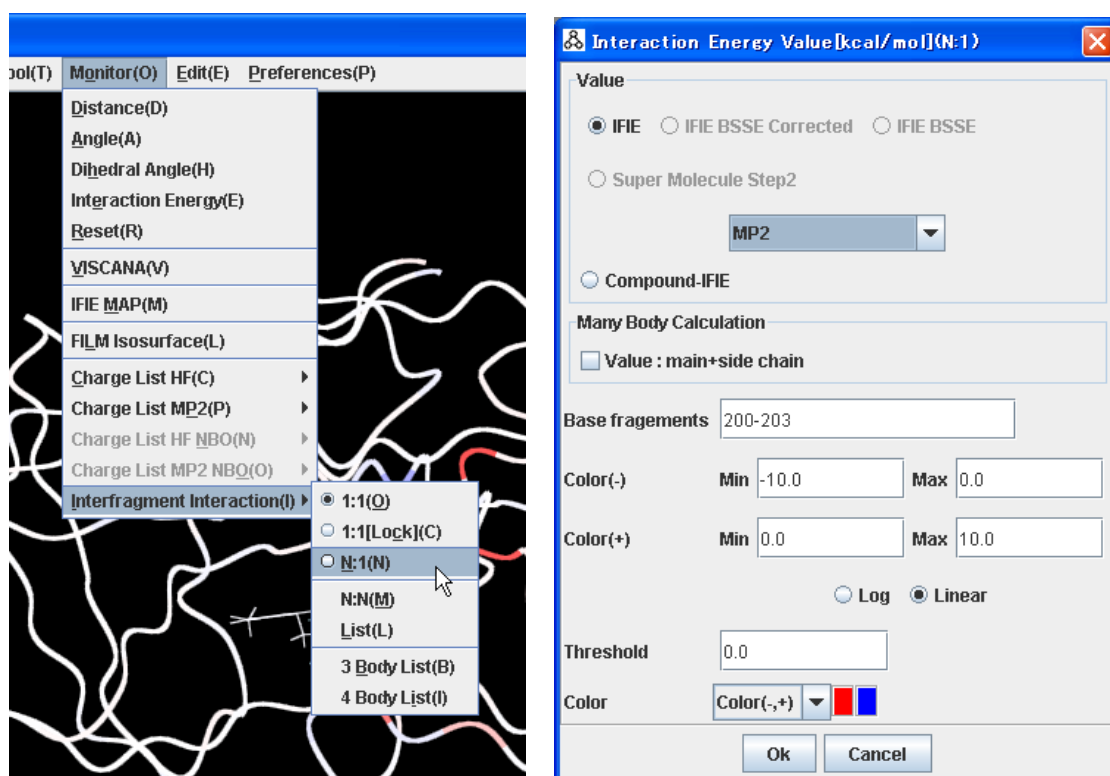


リガンドをクリックし、Monitor→Interfragment Interaction→1:1 を実行します。Value のプルダウンは MP2 を選択し、Color のテキストボックスでは -10 から 10 とします。

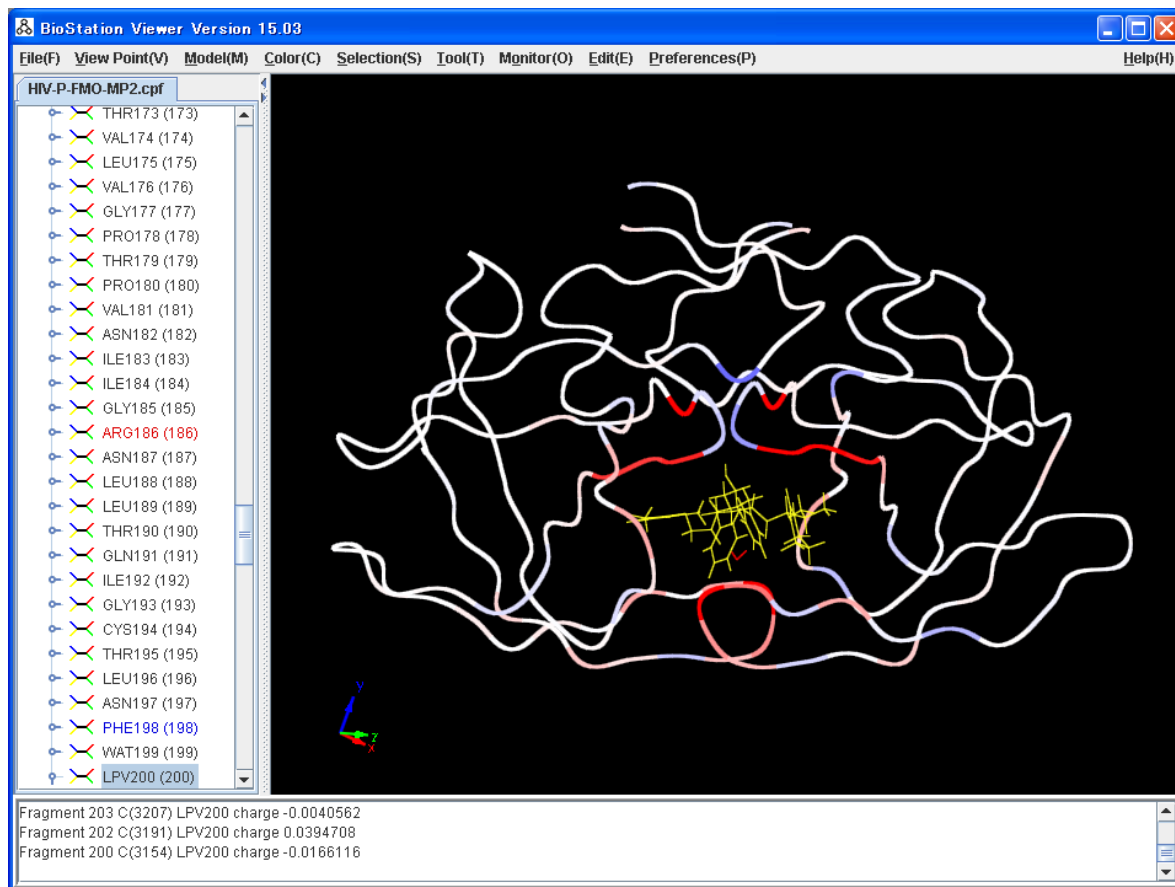
タンパク質の立体構造がリガンドとの IFIE に基づいて色付けされます。ここで本課題ではリガンドは4つのフラグメントに分割されているため、そのうち1つのフラグメントとの IFIE に基づいて周囲のタンパク質が色付けされます。



リガンド全体との IFIE に基づいて周囲のタンパク質を色付けしたい場合は、Monitor→Interfragment Interaction→N:1 を実行します。下右図の IFIE 設定画面の Base fragments にリガンドを構成する4つのフラグメントの番号を入力します。これは Base fragments テキストボックスをクリックしたあとに構造画面のリガンドをクリックすることで入力できます。



その結果、以下のようにリガンド全体との IFIE に基づいて周囲のアミノ酸を色づけることができます。



またこの状態で Monitor→Interfragment Interaction→List を実行するとリガンド全体と周囲のアミノ酸との IFIE を数値で表示することができます。

Interaction Energy			
File(F)			
Value:MP2			
Base fragment 200-203			
residue fragment		[kcal/mol]	
PRO1	(1)	1.114318	
GLN2	(2)	-0.049854	
ILE3	(3)	0.102473	
THR4	(4)	-0.181832	
LEU5	(5)	-0.134572	
TRP6	(6)	0.068682	
GLN7	(7)	0.170870	
ARG8	(8)	-0.198379	
PRO9	(9)	0.434138	
LEU10	(10)	-0.399804	
VAL11	(11)	0.120785	
THR12	(12)	0.033722	
...	...	...	...

4 課題 4 : Crambin のグリッドデータ解析

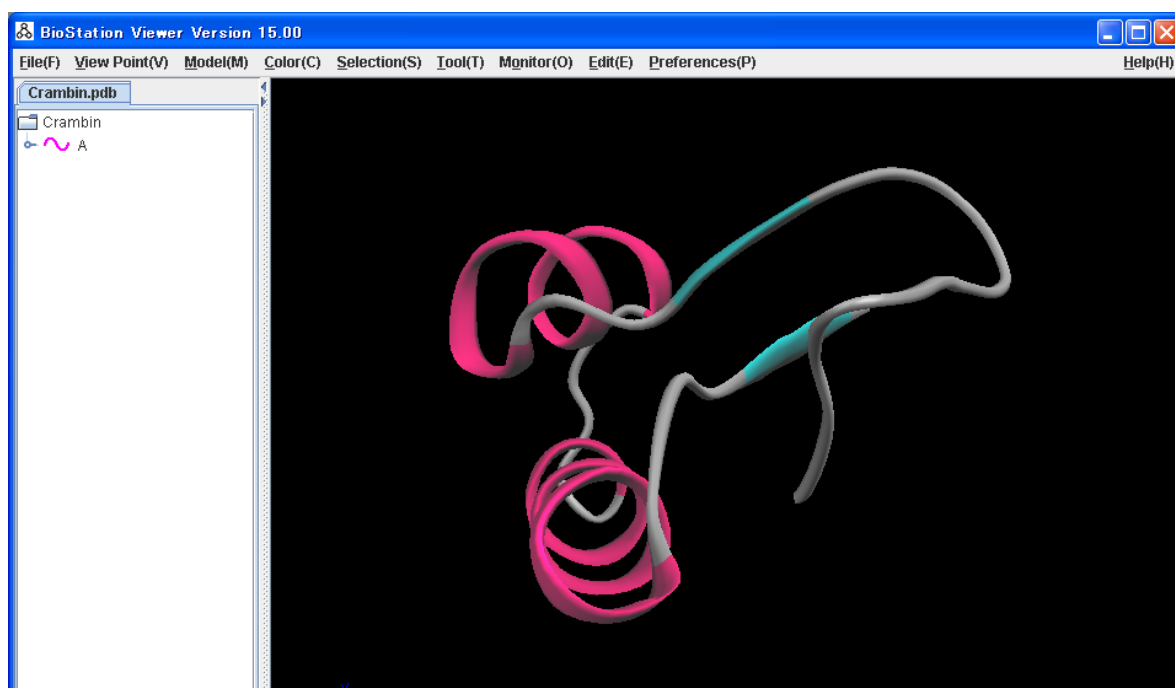
本課題では小規模タンパク質 Crambin の FMO-HF 計算を行い、電子密度や等電子密度面上の静電ポテンシャルマップのグリッドデータを出力・解析します。

4.1 入力データ作成

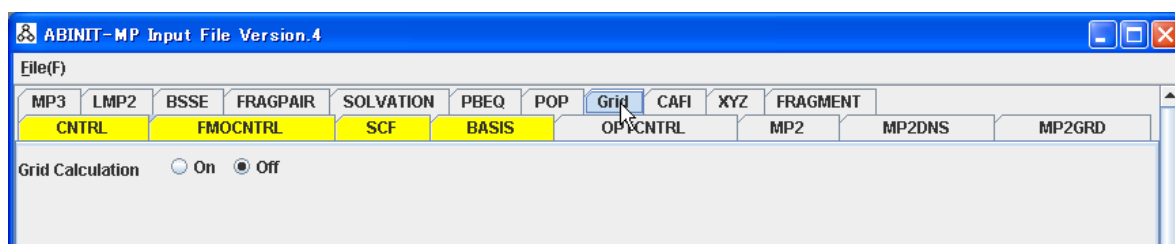
Crambin の構造を BioStation Viwer 読み込みます。Crambin の構造は以下のフォルダに格納されています。

```
C:\BioStation\seminar\exercise4\Crambin.pdb
```

Crambin の構造が表示されます。



入力ファイルを編集するため File→Edit ABINIT-MP Input File を実行します。グリッドデータを出力するためには Grid タブの Grid Calculation を On にします。



電子密度及び等電子密度面上の静電ポテンシャルマップのグリッドデータを出力するため、Electron

Density File と Map File を YES にします。

ABINIT-MP Input File Version 4.0

File(F)

MP3 LMP2 BSSE FRAGPAIR SOLVATION PBEQ POP Grid CFI XYZ FRAGMENT

CNTRL FMOCTRL SCF BASIS OPTCNTRL MP2 MP2DNS MP2GRD

Grid Calculation ☒ On ☐ Off

Check Point File File

Dimer Directory Directory

SCC File File

Monomer MP2 File File

CRA File File

Base Name

Isosurface Value

Electron Density File ☒ YES ☐ NO

Electrostatic Potential File ☐ YES ☒ NO

Map File ☒ YES ☐ NO

Electric Field Vector File ☐ YES ☒ NO

Partial Grid ☐ YES ☒ NO Region

MO File ☐ YES ☒ NO Region Level

PNO File ☐ YES ☒ NO

Bounding Box ☐ On/Redraw ☒ Off

Auto Grid ☒ YES ☐ NO

Grid Delta Size(Å)

Grid Box Space(Å)

また、電子密度のグリッドデータなどを出力する際は、各フラグメントの MO 係数を中間ファイルに保存しておく必要があるため、FMOCTRL タブの Dimer directroy に適当な名前を入力し、Write Dimer File を YES にします。

Read Monomer MP2 File File

Write Dimer ES File File

Read Dimer ES File File

Write Dimer File ☒ YES ☐ NO

Read Dimer File ☐ YES ☒ NO

Dimer directory Browse

その他、CNTRL タブはこれまでの課題同様に Method を HF にし、ReadGeom や WriteGeom を設定します。パラメータの設定が完了したら File→Save File を実行して入力ファイル (Crambin-FMO-GRID.ajf) を保存します。

4.2 FMO 計算

FMO 計算の実行方法はこれまでの課題の時と同じですが、今回はダイマーフラグメントの MO 係数を保存するディレクトリを指定しているので、まずのそのディレクトリを作成します。

```
mkdir dimer
```

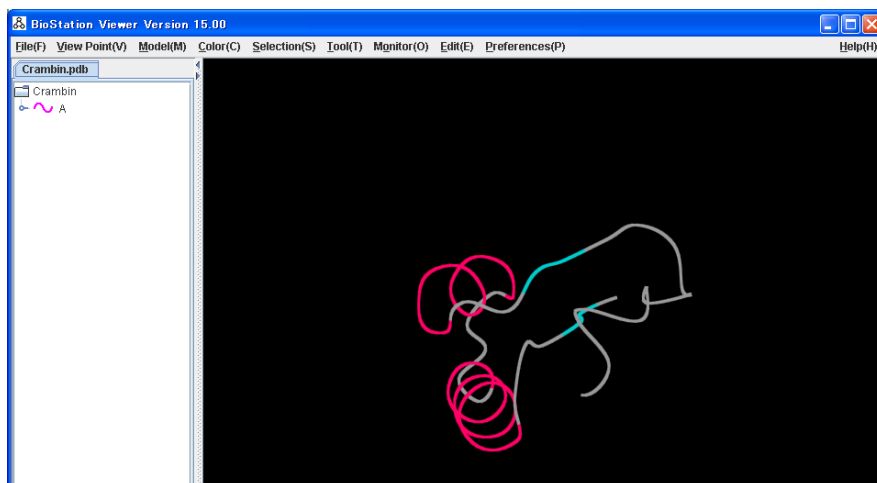
次に、例えば 48 プロセスの並列計算を実行する場合は以下のように ABINIT-MP を実行します。

```
mpirun -n 48 abinitmp < Crambin-FMO-GRID.ajf >& Crambin-FMO-GRID.log &
```

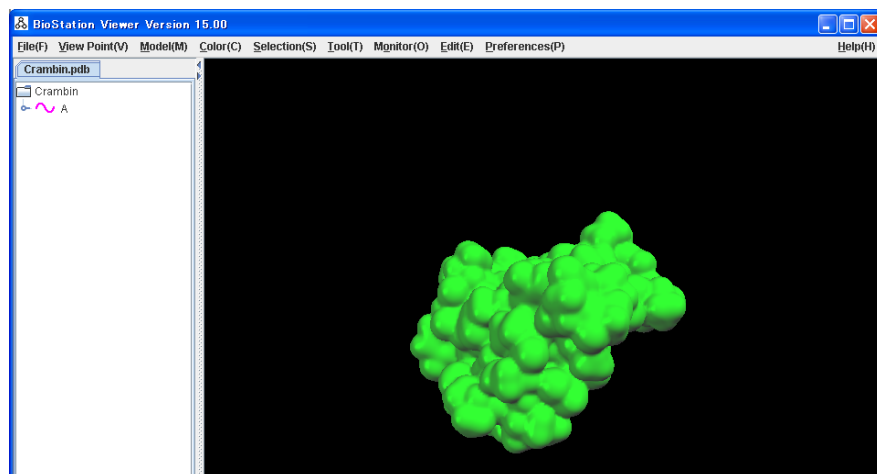
計算が完了すると Crambin-FMO-GRID.log、Crambin-FMO-GRID.cpf、Crambin-FMO-GRID.den、Crambin-FMO-GRID.map などが出力されるのでこれらのファイルをダウンロードします。

4.3 グリッド可視化解析

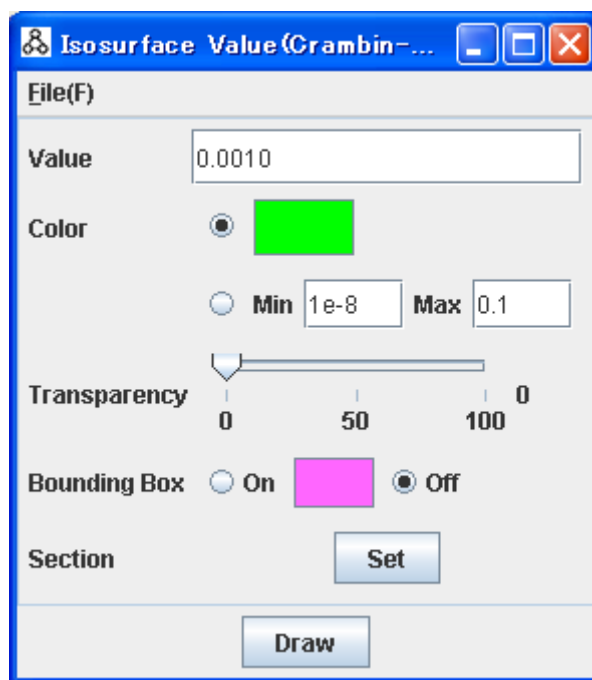
まず、PDB ファイルを読み込みます。



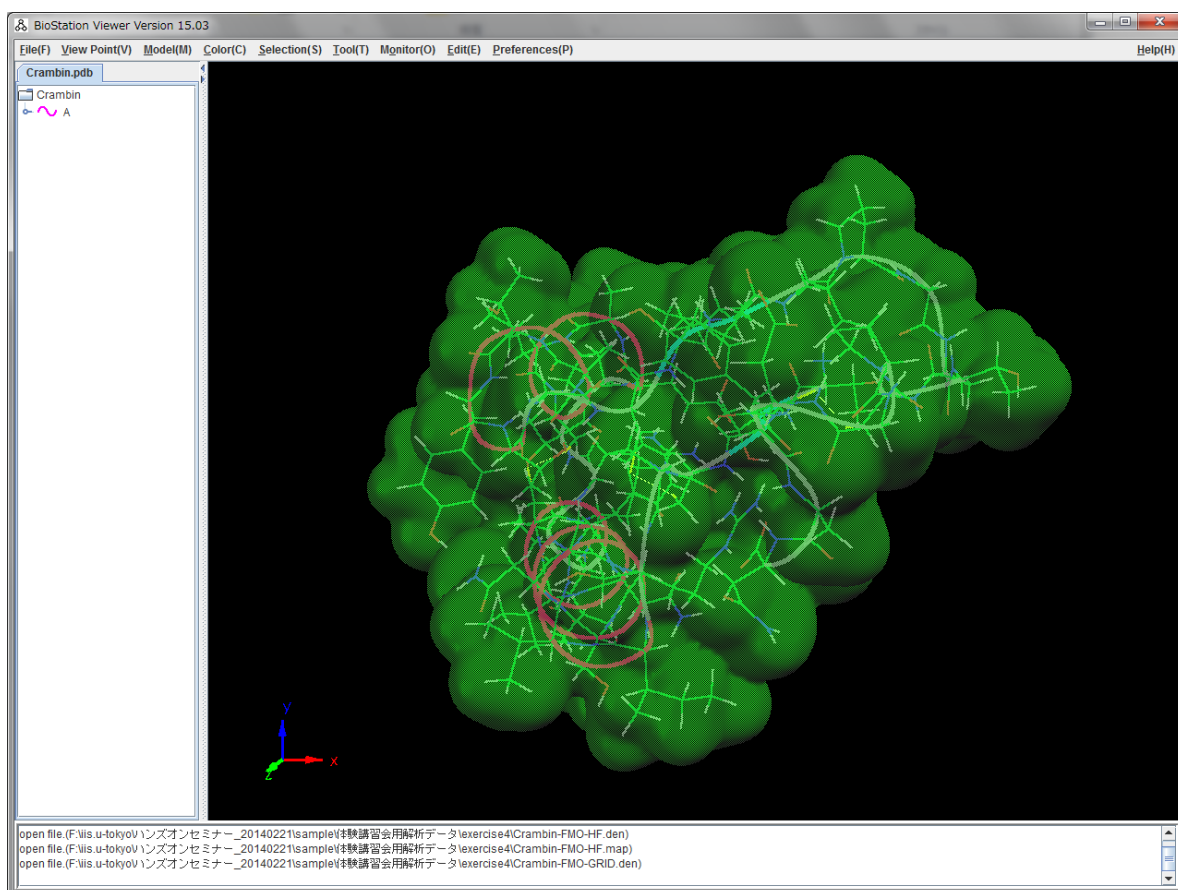
続けて、Crambin-FMO-GRID.den を読み込みます。電子密度の等値面が表示されます。



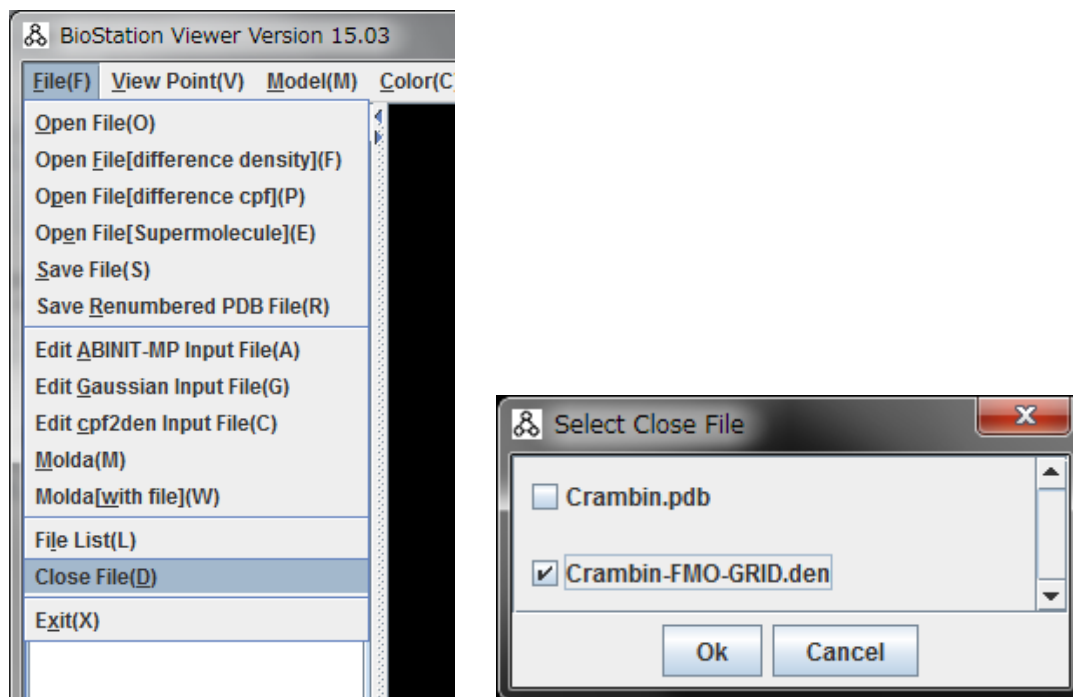
電子密度グリッドデータを読み込むと以下のウィンドウが表示されます。Value の値を変更することでどの等値面を表示するかを変更できます。また、Transparency を変更することで等値面の透過率を変更することができます。



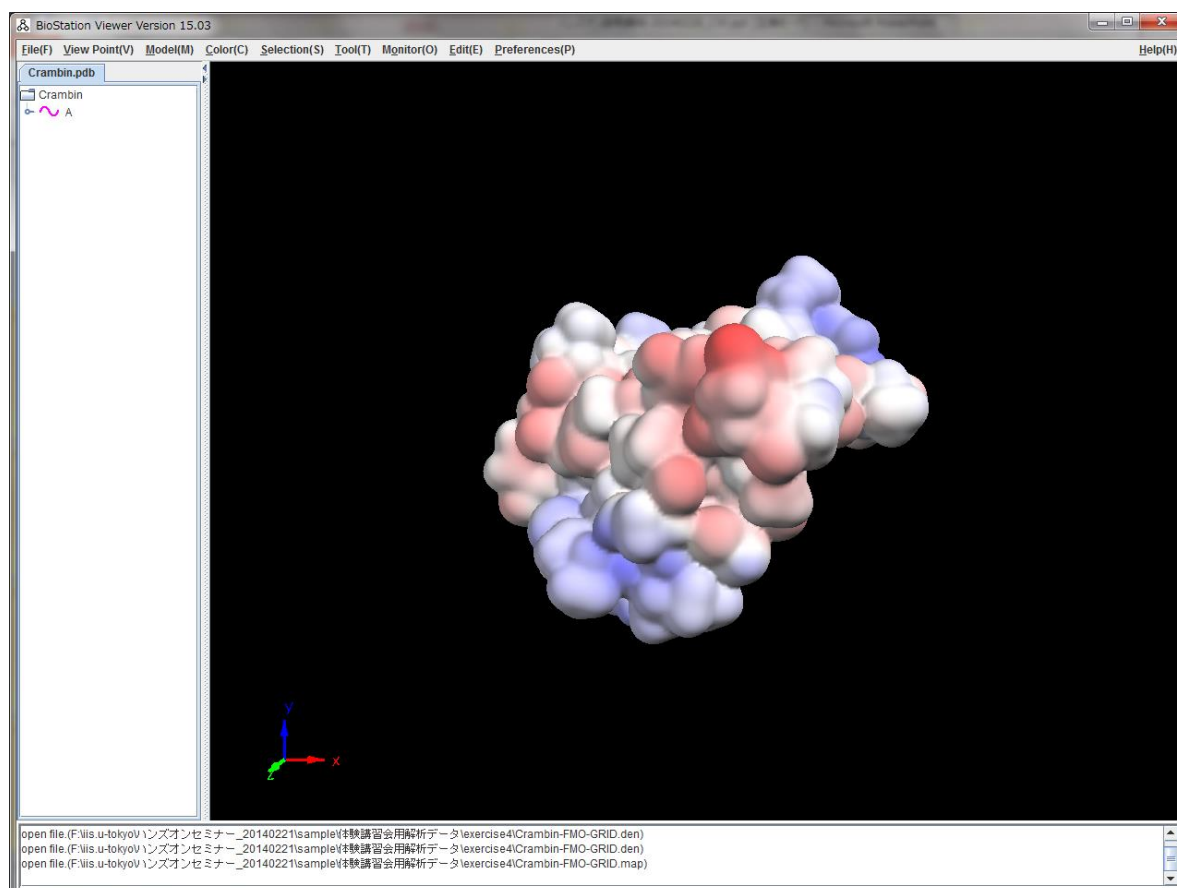
以下は透過率を 50%に変更し、Atom を Wire frame で Structure を Solid ribbon で表示した結果です。



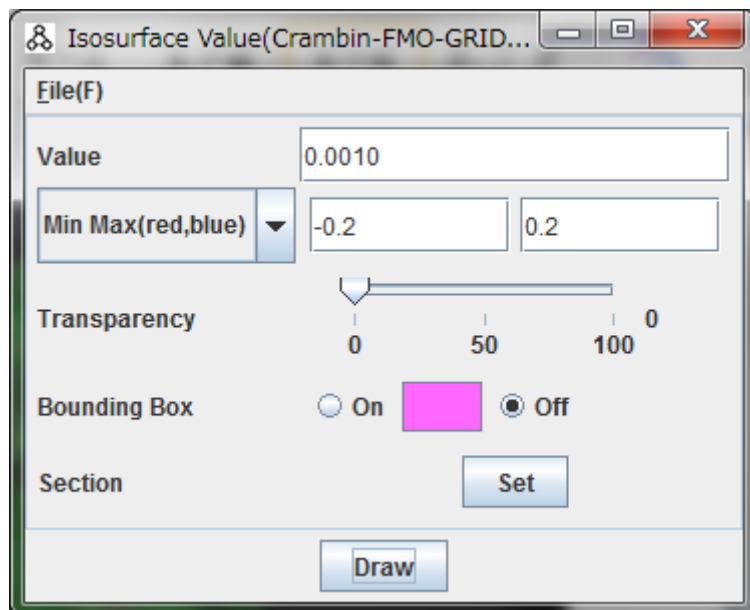
次に、静電ポテンシャルマップのグリッドデータを表示します。まず、File→Close File を実行し、Crambin-FMO-GRID.den を閉じます。



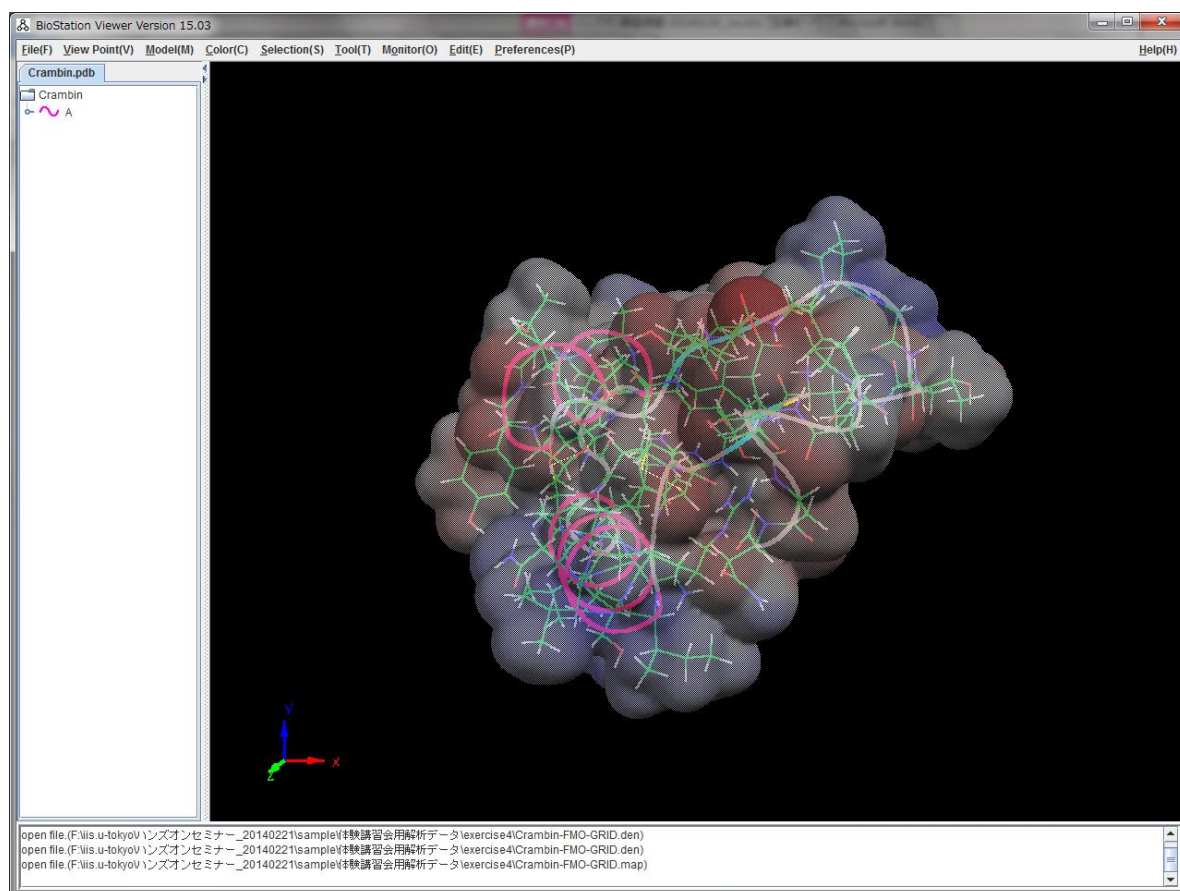
静電ポテンシャルマップのグリッドデータ Crambin-FMO-GRID.map を BioStation Viewer にドラッグ&ドロップします。等電子密度面上の静電ポテンシャルマップが表示され、負のポテンシャルを持つ箇所が赤く、正のポテンシャルを持つ箇所が青く表示されます。



静電ポテンシャルマップのグリッドデータを読み込むと以下のウィンドウが表示されます。また、**Transparency** を変更することで等値面の透過率を変更することができます。**Value** には計算時に指定した等値面の値が表示されます。



以下は透過率を 50%に変更し、Atom を Wire frame で Structure を Solid ribbon で表示した結果です。



5 解析データ一覧

本講習会の解析データは以下のように格納されています。

BioStation	
+- seminar	
+- exercise1	課題 1
+- TrpCage.pdb	構造ファイル
+- run_smp.sh	スクリプトファイル
+- exercise2	課題 2
+- ER_50res.pdb	構造ファイル
+- run_smp.sh	スクリプトファイル
+- exercise3	課題 3
+- HIV-P.pdb	構造ファイル
+- run_smp.sh	スクリプトファイル
+- exercise4	課題 4
+- Crambin.pdb	構造ファイル
+- run_smp.sh	スクリプトファイル
+- seminar-with-results	
+- exercise1	課題 1
+- TrpCage.pdb	構造ファイル
+- TrpCage-FMO-HF.ajf	入力ファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- TrpCage-FMO-HF.log	ログファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- TrpCage-FMO-HF.cpf	CPF ファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- TrpCage-FMO-MP2.ajf	入力ファイル (FMO-MP2/6-31G 計算)
+- TrpCage-FMO-MP2.log	ログファイル (FMO-MP2/6-31G 計算)
+- TrpCage-FMO-MP2.cpf	CPF ファイル (FMO-MP2/6-31G 計算)
+- exercise2	課題 2
+- ER_50res.pdb	構造ファイル
+- ER_50res-FMO-HF.ajf	入力ファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- ER_50res-FMO-HF.log	ログファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- ER_50res-FMO-HF.cpf	CPF ファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- ER_50res-FMO-MP2.ajf	入力ファイル (FMO-MP2/6-31G 計算)
+- ER_50res-FMO-MP2.log	ログファイル (FMO-MP2/6-31G 計算)
+- ER_50res-FMO-MP2.cpf	CPF ファイル (FMO-MP2/6-31G 計算)
+- exercise3	課題 3
+- HIV-P.pdb	構造ファイル
+- HIV-P-FMO-HF.ajf	入力ファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- HIV-P-FMO-HF.log	ログファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- HIV-P-FMO-HF.cpf	CPF ファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- HIV-P-FMO-MP2.ajf	入力ファイル (FMO-MP2/6-31G 計算)
+- HIV-P-FMO-MP2.log	ログファイル (FMO-MP2/6-31G 計算)
+- HIV-P-FMO-MP2.cpf	CPF ファイル (FMO-MP2/6-31G 計算)
+- exercise4	課題 4
+- Crambin.pdb	構造ファイル
+- Crambin-FMO-GRID.ajf	入力ファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- Crambin-FMO-GRID.log	ログファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- Crambin-FMO-GRID.cpf	CPF ファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- Crambin-FMO-GRID.den	DEN グリッドファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- Crambin-FMO-GRID.map	MAP グリッドファイル (FMO-HF/STO-3G 計算)
+- demo	
+- ER-cafi	エストロゲン受容体の CAFI
+- ER-FILM	エストロゲン受容体の FILM
+- IFIE-MAP-DNA-CRP	DNA-CRP 複合体の IFIE-MAP
+- VISCANA-AR_ligands	アンドロゲンレセプターの VISCANA

6 利用ソフト一覧

本講習会で利用したソフトウェアの一覧を以下に示します。

- BioStation Viewer Ver. 15.03
- ABINIT-MP Ver. 6+
- WinSCP (ファイル転送ソフト)
- EmEditor Free (テキストエディタ)
- PuTTY (ターミナル)