

*Homology Modeling Professional for  
HyperChem* マニュアル

辻 一徳

*Homology Modeling Professional for HyperChem* マニュアル

分子機能研究所

埼玉県三郷市高州 2-105-14

本マニュアルの内容については正確な記述に努めましたが、著者は本マニュアルおよびここで使用されるソフトウェアに対して、なんらかの保証をするものではなく、また、本マニュアルの内容によるいかなる結果についても、一切の責任を負いません。

本マニュアルに記載のソフトウェアは指定されたライセンスによってのみ入手できます。

本マニュアルに記載の内容は、予告なく変更する場合があります。

本マニュアルの全部または一部を無断で複製、転載、磁気媒体へ入力することを禁じます。

*HyperChem* は Hypercube 社の登録商標です。

*Gaussian* は Gaussian 社の登録商標です。

その他の商品名は各社の商標または登録商標です。

Copyright © 2005-2010, Institute of Molecular Function

All Rights Reserved.

ISBN: 978-4-9902513-2-6

Printed in JAPAN

## *Homology Modeling Professional for HyperChem* マニュアル

本マニュアルはソフトウェアプログラム、*HyperChem* 上でタンパク質分子システムのホモロジーモデリング、生体高分子システムの機能解析やシミュレーションを実施するための参考書として役立ちます。ここでの内容は *Homology Modeling Professional for HyperChem* リビジョン E1 以降 (Version5.11) に対して記載されています。

Windows の概念やダイアログボックスなどの基本操作はすでに周知のものとして記載されます。これらに関して補助を必要とする場合は、Windows のマニュアル等を参照してください。*HyperChem* の特徴、オプション、操作方法についての補助を必要とする場合は、*HyperChem* のユーザーリファレンスを参照してください。また、*Gaussian* のキーワード、計算理論について補助を必要とする場合は、*Gaussian* のユーザーリファレンスを参照してください。

# 目次

概要	7
推奨最小システム構成	8
必要なソフトウェア	9
インストール	10
<i>TclPro1.2</i> (Windows 版) のインストール	10
<i>Homology Modeling Professional for HyperChem</i> のインストール	11
各モジュールプログラムの説明	14
<i>HyperChem8</i> での注意点	16
<i>HyperChem</i> 各バージョンでの注意点	17
初期設定	18
<i>HyperChem</i> レンダリング初期設定	21
基本操作	22
準備	22
起動	23
新規プロジェクト	23
初期 3D モデル作成	27
二次構造コンフォメーションのモデリング (主鎖モデリング)	36
鋳型タンパク質分子システム成分の抽出	38
結晶水水素原子の初期構造調整	44
生体高分子末端残基モデリング	46
生体高分子システムにおける低分子モデリング	50
側鎖モデリング	57
水素結合ネットワーク調整	63
モデル精密化前処理	64
モデル精密化	65

スナップショットファイル解析	73
手順	73
タンパク質分子に共有結合した低分子のモデリング	75
準備	75
挿入配列モデリング	76
タンパク共有結合低分子モデリング	84
完全自動側鎖モデリング	91
準備	91
手順	91
タンパク質分子システムにおける ONIOM 計算	94
準備	94
手順	94
束縛モジュールプログラムの応用利用	100
準備	100
手順	100
二体間相互作用モデルの <i>Gaussian</i> マルチステップジョブ計算	103
準備	103
手順	103
既知構造データの精密化	108
準備	108
手順	109
ポイントミュレーション	119
準備	119
手順	119
核酸分子システムの構造精密化	125
準備	125
手順	125
References	133