

## HyperChem Chemical Template ファイルに関して

HyperChem バージョン 7.0 以降では、以下の問題が影響する場合がありますので、解決策を参考に「chemct.tpl」ファイルを修正もしくは修正済みファイルで置き換えてください。

タンパク C 末端がグルタミン (Gln) の場合、主鎖 C 末端カルボニル炭素 (原子名 : C) の原子名が HC と誤ってアサインされる場合がある。

### [解決策]

HyperChem のインストールフォルダ内の「Runfiles」内にある「chemct.tpl」ファイルの問題箇所をテキストエディタ等で修正してください。「chemct.tpl」の修正作業は HyperChem の動作に致命的損傷を与える可能性がありますので、十分注意して、自己責任において実施してください。オリジナルの「chemct.tpl」は上書きせずに予め別名で確保しておかれることを推奨します。

### [修正方法]

「chemct.tpl」ファイル内の「; GLUTAMINE」の「C:」記述欄の「amber94」行（下記アンダーライン行）がデフォルトでは「HC」となっていますので、これを「C」に変更してください。

```
; GLUTAMINE      COO- ANION
[GLN GLX]A
N:                N 1      (H s -3 s CA s)          ¥
                   opls    N      -0.5700  imp -3 CA N H ¥
                   amber   N      -0.4630  imp -3 CA N H ¥
                   amber94 N      -0.3821  imp -3 CA N H ¥
                   bio+    NH1    -0.3500  imp N -3 CA H ¥
                   charmm22 NH1 -0.47      imp N -3 CA H ¥
                   int -3  1.335 -2  116.60 -1  180.00
~~~~~
中略
~~~~~
C:                C 3      (CA s O a OXT a)          ¥
                   opls    C      0.7000  imp CA OXT C O ¥
                   amber   C      0.5240  imp CA OXT C O ¥
                   amber94 C      0.7775  ¥
                   bio+    C      0.1400  imp C CA OXT O ¥
                   charmm22 CC     0.34    imp C CA OXT O ¥
```