

# チュートリアル

---

## MolDesk Basic を使った sievgene\_NMR

MolDesk Basic Ver. 1.1.46 を使用

株式会社バイオモデリングリサーチ

2018/05/30

本チュートリアルでは、MolDesk Basic を使った sievgene\_NMR の計算実行手順について説明します。

# 目次

1. 本チュートリアルの内容.....	1
2. 本チュートリアルで使用するファイル.....	1
3. タンパク質分子の読み込み.....	1
4. リガンド分子の読み込み.....	2
5. ドッキングのターゲットサイトの指定.....	3
6. レセプターの指定.....	4
7. ドッキング NMR(sievgene_NMR)の実行.....	5
8. ドッキングポーズの出力.....	7

## 1. 本チュートリアルの内容

本チュートリアルでは、MolDesk Basic で sievgene\_NMR を実行する手順について学習します。

## 2. 本チュートリアルで使用するファイル

```
sievgene_NMR_sample/  
|-- 1A9U/  
|   |-- Pro.pdb  
|   |-- Lig.mol2  
|   |-- coeff.nmr  
|   |-- expr.nmr  
|-- 1KV1/  
|   |-- Pro.pdb  
|   |-- Lig.mol2  
|   |-- coeff.nmr  
|   |-- expr.nmr
```

## 3. タンパク質分子の読み込み

分子の読み込みは、”File” → ”Open Molecular File” でファイル選択のダイアログからファイルを選択します。ここでは、まず、1A9U/Pro.pdb を読み込みます。



図 1 PDB ファイル読み込み直後の画面

## 4. リガンド分子の読み込み

”Command View”で”Docking”のタブを選択し、そのボタンの中から、”Insert from File”をクリックします。ファイルを指定するダイアログが出てきますので、sievgene\_NMR\_sample/1A9U/Lig.mol2を選択します。Position Select は、ここでは”file”を設定します。”file”を選ぶと、ファイルの中に書かれている座標通りに分子が配置します。”mouse”を選択すると、マウス操作で、読み込み時の分子の配置を変更できます。



図 2 リガンド分子の読み込み



図 3 リガンド分子読み込み時の Position Select

図4は、リガンド分子読み込み後に、リガンドが見やすくなるように、リガンドを“Space filling”で表現したものです。

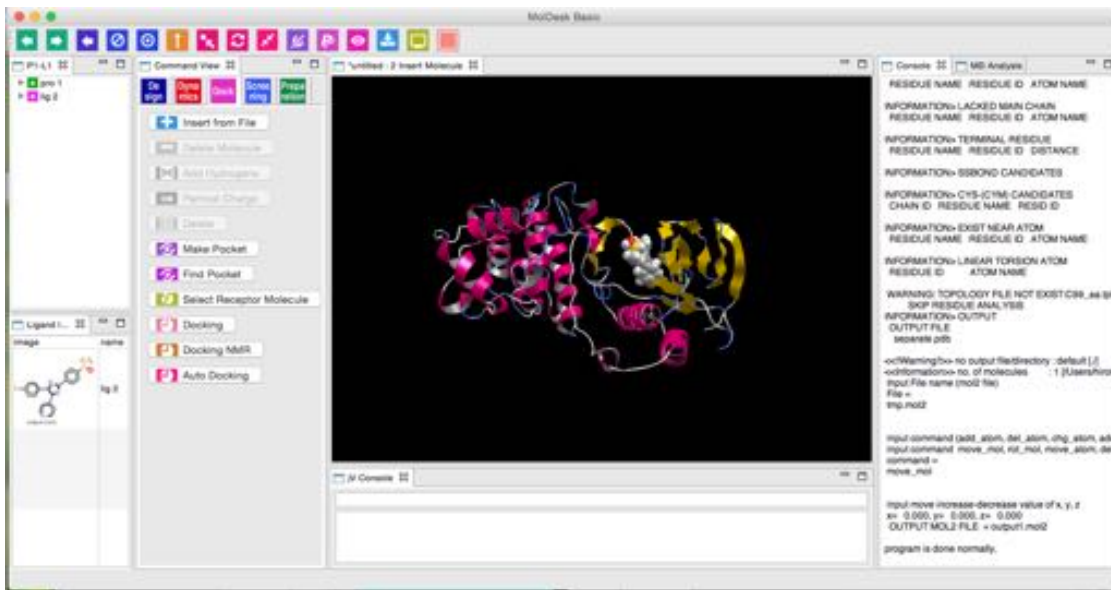


図4 リガンド分子読み込み後の画面

## 5. ドッキングのターゲットサイトの指定

ここでは、読み込んだリガンドの原子座標を、ターゲットサイト指定するためのプローブ点として使用します。まず、Command View において Docking タブが選択されていない場合には、Docking タブを選択します。Tree View で lig2 を選択後に、Command View の”Make Pocket”ボタンをクリックしてください。



図5 ポケットの指定

Tree View に point3 が出現していることを確認します。

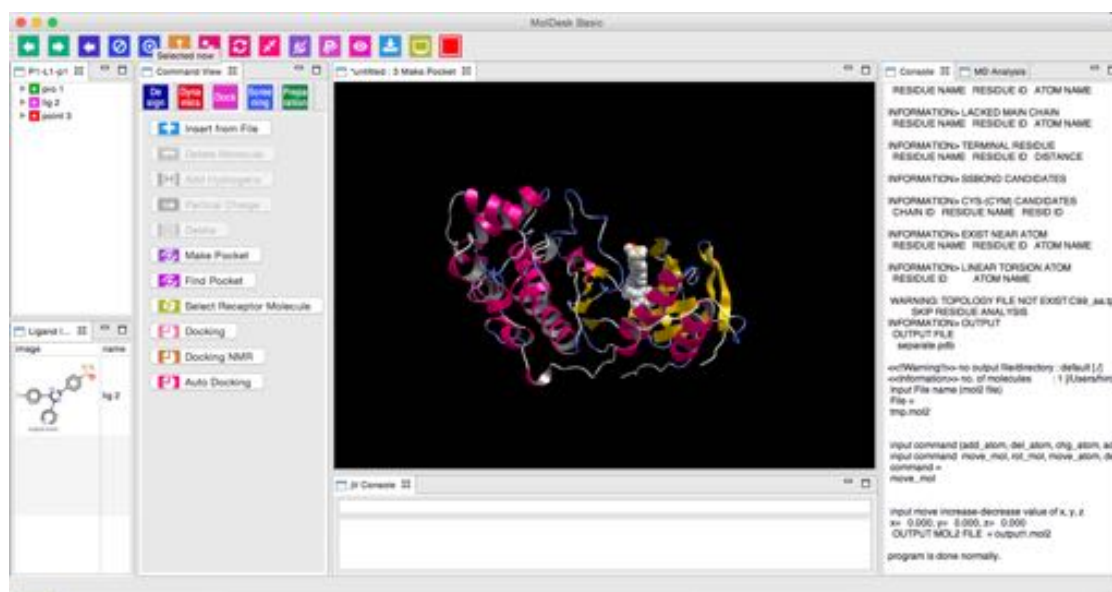


図 6 ドッキングサイト指定後の画面

## 6. レセプターの指定

次に、レセプターの指定をします。ここでは、pro1 を選択後に、“Select Receptor Molecule”をクリックします。クリック後に、Tree View の pro1 の右に[Receptor]の文字が現れます。

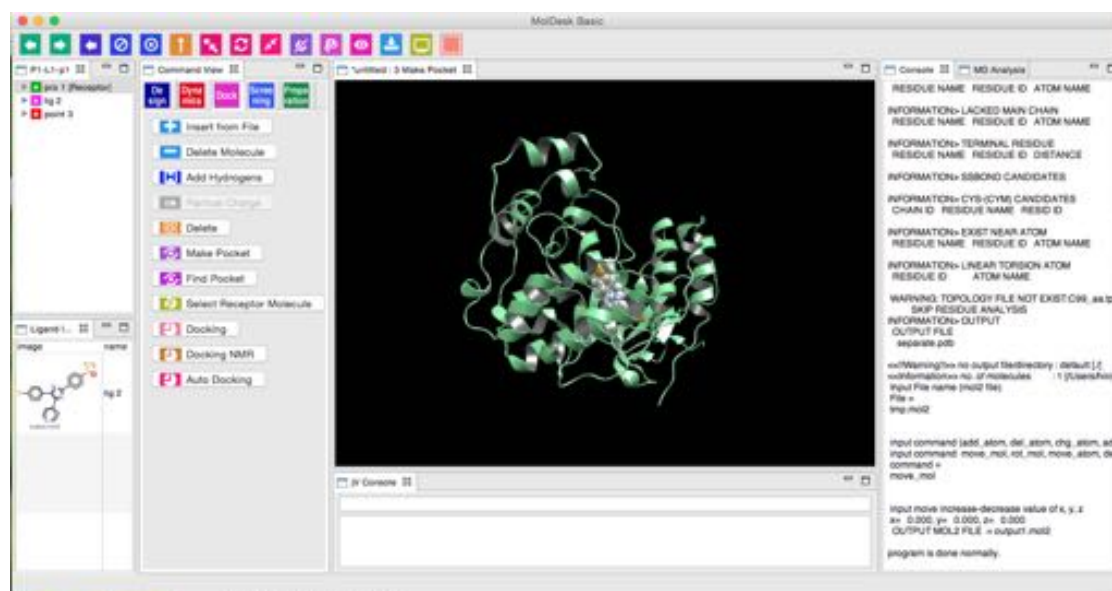


図 7 レセプターの指定

## 7. ドッキング NMR(sievgene\_NMR)の実行

準備が整いましたので、ドッキング NMR を実行します。Command View の Dock タブの “Docking NMR” をクリックしてください。クリックすると図 8 のダイアログが出てきます。Tree View の lig2 を選択後に、OK ボタンをクリックします。

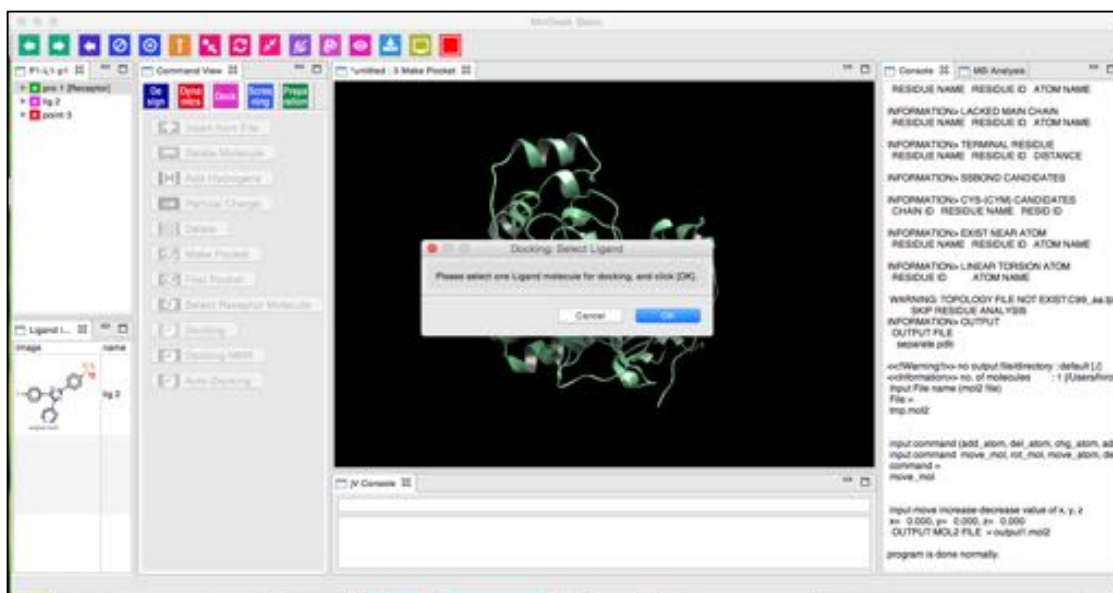


図 8 リガンド分子の指定

次に、Docking NMR の設定画面が出てきます。ここでは、左側の Method を Rigid→Flexible に変更します。また、“Select NMR experiment file” のボタンをクリックし、その後、sievgene\_NMR\_sample/1A9U/expr.nmr を読み込みます。

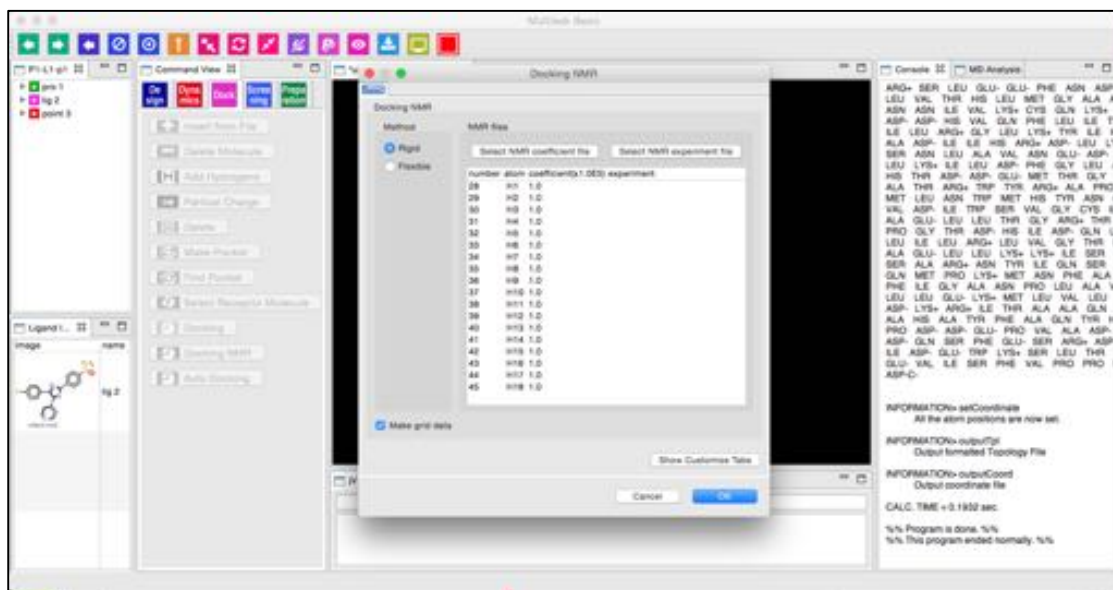


図 9 NMR 測定値の読み込み

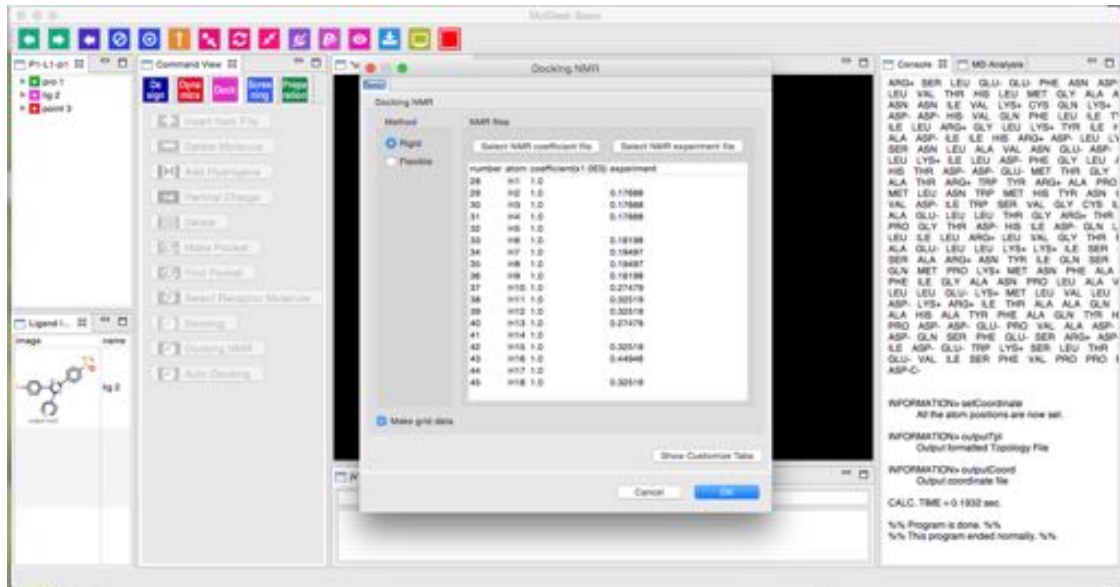


図 10 NMR データ読み込み後の画面

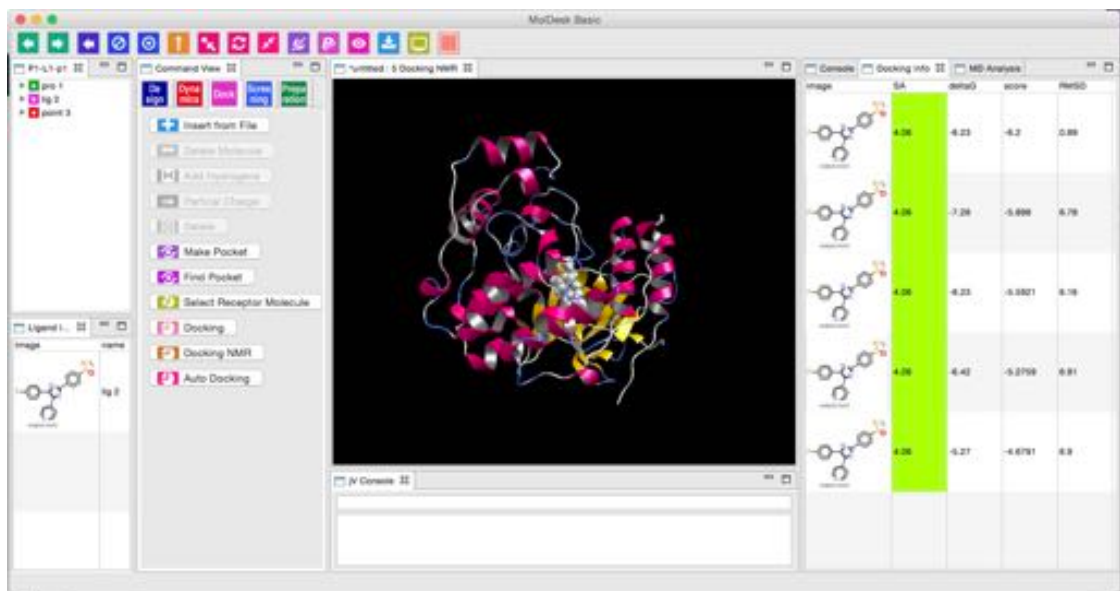


図 11 ドッキング NMR 計算完了後の画面



Docking Info タブにおいて、分子イメージをクリックすると、クリックしたドッキングポーズが、真ん中の 3D View に現れます。複数分子を選択することもできます。

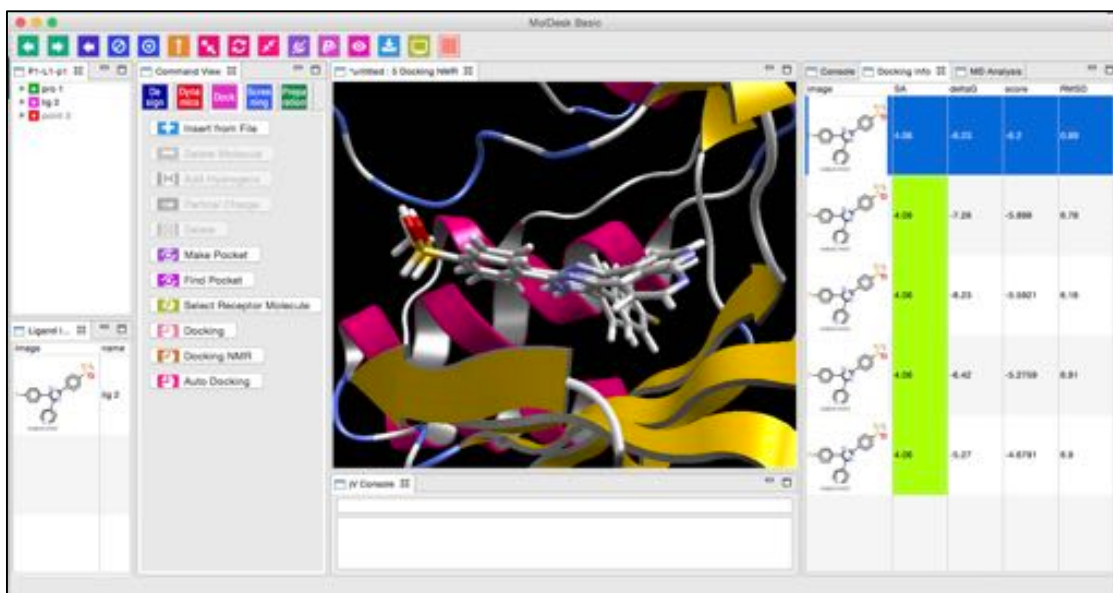


図 12 ドッキングポーズの観察

## 8. ドッキングポーズの出力

Docking Info タブのドッキングポーズは、直接ファイルに出力することができません。ドッキングポーズをファイルに出力するためには、Docking Info タブの分子イメージを選択後に右クリックすると現れる”Add Selected Docking Result”をクリックします。

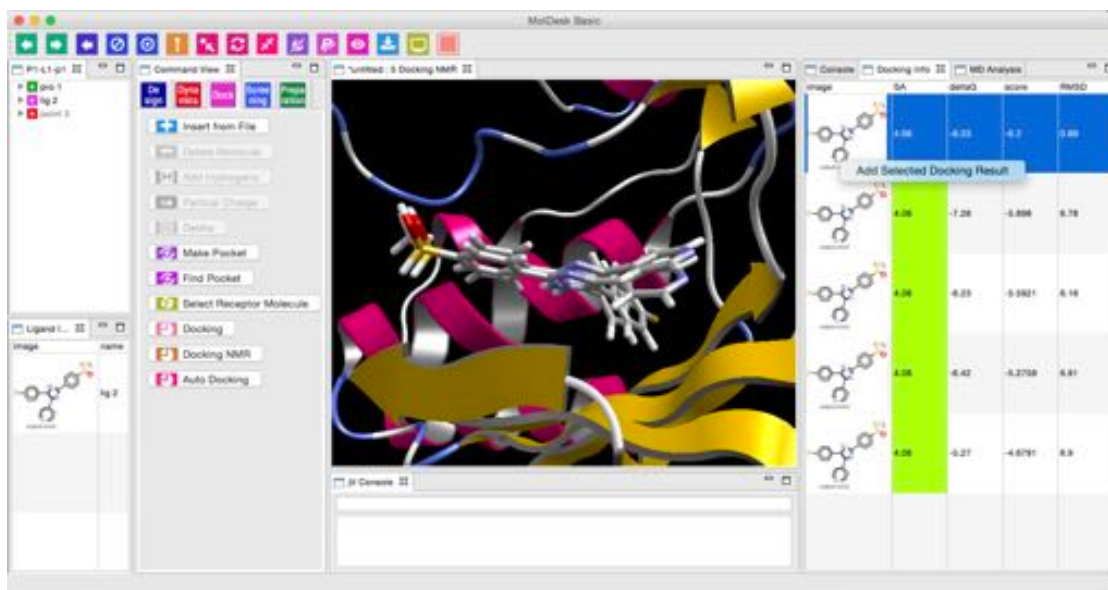


図 13 ドッキングポーズのデータ移動 1

Tree View に lig4 が追加されました。

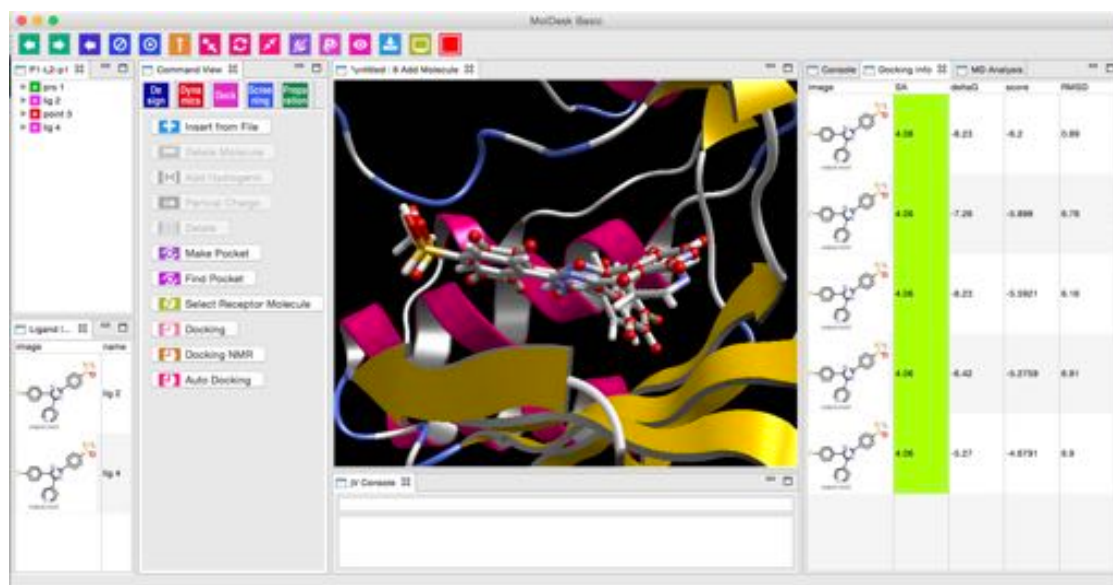


図 14 ドッキングポーズの移動 2

Tree View の分子は、ファイルに出力することができます。出力したい分子を選択後に、右クリックして、出て来るメニューの中から適当なものを選びます。低分子化合物のドッキングポーズは、“Export Single Mol2”を選択すると扱いやすいかもしれません。

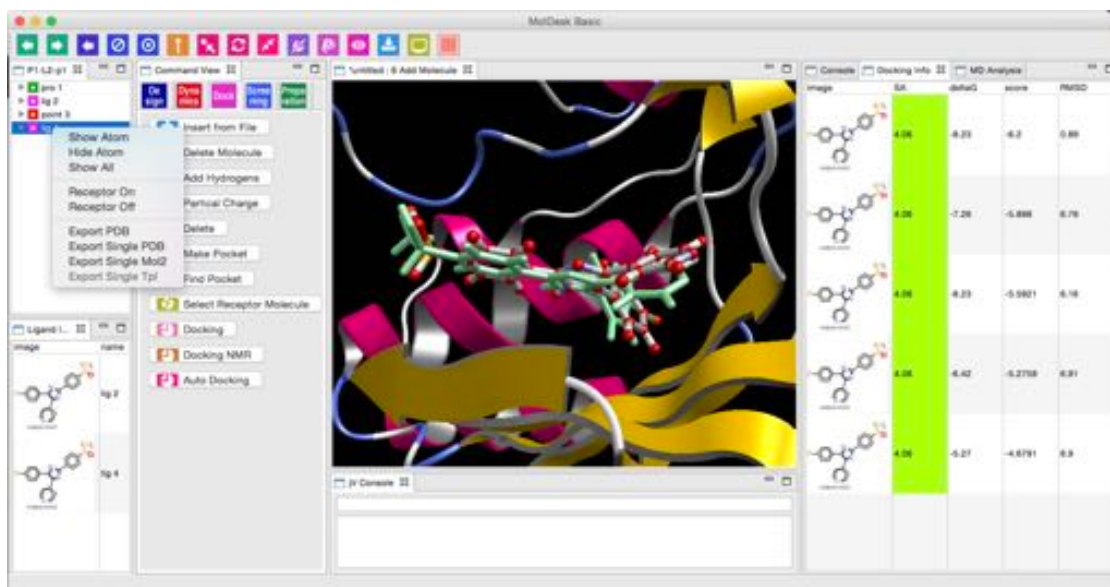


図 15 ドッキングポーズの出力