

立体構造可視化プログラム RasMol の使い方

川端 猛

PDB 形式の立体構造データを表示するソフトは多数存在しますが、現在、最もよく使われているソフトウェアは RasMol です。グラフィックスは比較的簡素ですが、描画は高速で、幅広いプラットフォームで同様に動作するのが特長です。http://www.openrasmol.org にアクセスすれば、Windows 版、Mac 版、Linux 版の実行ファイル、ソースコードを入手することが可能です。

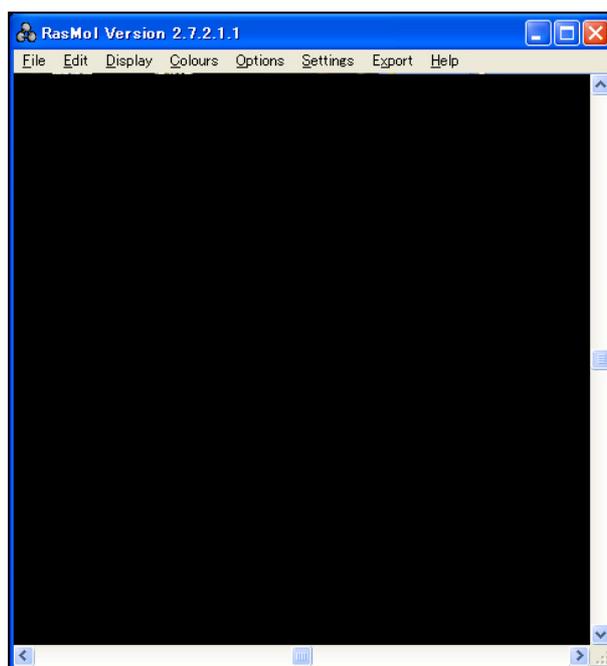
UNIX で起動するには以下のコマンドを打ちます。

```
rasmol
```



Windows の場合は、 というアイコンをクリックしてください。

次のようなウィンドウが起動するはずですが。

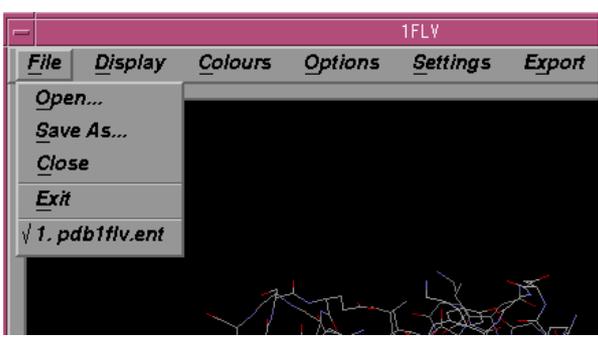
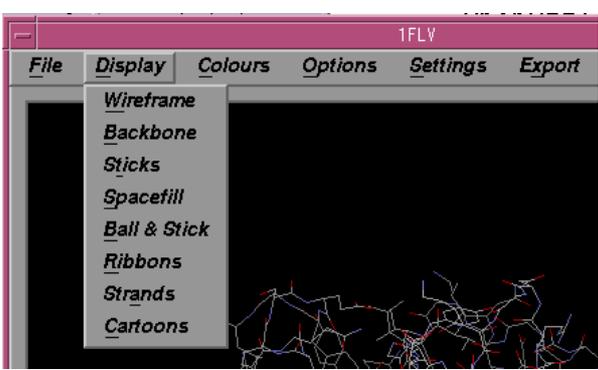
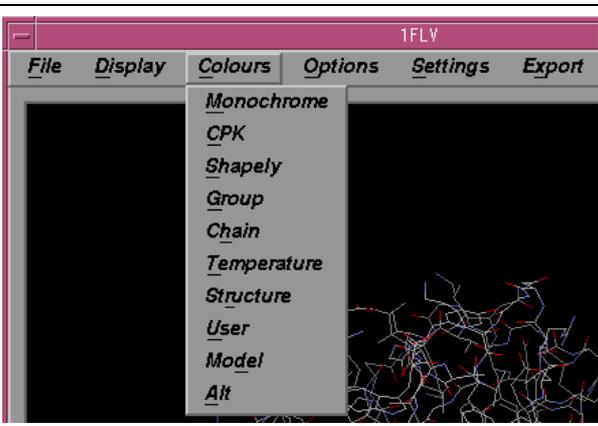


3.1 メニューによる RasMol の簡易操作

まず、マウスによる回転・並進操作になれてください。マウスを分子が描画している画面でボタンを押しながら動かすことで、分子を回転・並進させることができます。基本は以下の3つです。

左ボタン	回転 (X 軸、Y 軸まわりの回転)
中ボタン	移動 (X、Y 方向への並進)
Shift キー + 左ボタン	ズーム (拡大、縮小)

また、画面上部のメニューを操作することで、いろいろな描画法、色付け法を試すことができます。

	<p>[File]メニューから、[Open], [Save As...], [Close], [Exit]を選ぶことができます。</p>
	<p>[Display]メニューから、[Wireframe], [Backbone], [Sticks], [Spacefill], [Ball & Stick], [Ribbons], [Strands], [Cartoons]の表示様式を選ぶことができます。</p>
	<p>[Colours]メニューから、[Monochrome], [CPK], [Shapely], [Group], [Chain], [Temperature], [Structure], [User], [Model], [Alt]の色付けを選ぶことができます。</p>

3.2 コマンドラインによる RasMol の操作

RasMol は、ターミナルから、コマンドを入力することで、より細やかな表示の指定が可能になります。UNIX の場合、RasMol を立ち上げると、分子グラフィックスのウィンドウが表示されると同時に、立ち上げたターミナルに、以下のようなコマンドプロンプトが現れるはずですが。

```
RasMol>
```

Windows の場合、画面下のメニューバーの RasMol Command Line というボタンをクリックすると、コマンドを入力するウィンドウが立ち上がります。



ここにコマンドを入力すると、様々な表示法を指定することができます。RasMol のコマンドはキャラクターベースのインターフェース (CUI) という点で、UNIX コマンドや gnuplot のコマンドと似ているところもあります。基本的に、[選択]をしてから、選択された原子に対して[アクション]をするという作法です。

>> RasMol のコマンドラインの使い方 <<

- [1. 選択] : select コマンド等を使って、対象とする原子を指定する。
- [2. アクション] : 選択された原子について、なんらかの表示をするコマンドを実行する。

よって、常に、今、何が選択されているか、意識して使う必要があります。最初に立ち上げた状態では、全ての原子が選択された状態になっています。コマンドの詳細については、付録の RasMol コマンドのリファレンスのページを参考にしてください。以下に、いくつか、選択、アクションの組み合わせの例を示します。

(1) 全てを空間充填モデルで表示する

```
RasMol> select all  
RasMol> spacefill true
```

こうすると、たいていの場合、大量の水の酸素の球が表示されてしまいます。水の空間充填モデルの表示を止めるには以下のようにします。

```
RasMol> select water  
RasMol> spacefill false
```

そうすると、水の空間充填モデルが解除されます。この spacefill のところを変えるといろいろ他の表示法が指定できます。重要なものは以下の4つです。

- spacefill** : 空間充填モデル
- wireframe** : ワイヤーフレームモデル
- backbone** : バックボーンモデル

cartoon :カートゥーンモデル

また、分子の選択についても、`select water` 以外に、以下のような選択ができます。

select water : 水を選択

select protein : タンパク質を選択

select dna : DNA を選択

select ligand : 結合している低分子を選択

(2) 選択した種類のアミノ酸だけ、色を変える

Cysteine だけを選択して、色を黄色に変えたい場合、以下のようなコマンドを打ちます。

```
RasMol> select cys
RasMol> color yellow
```

色としては、`color yellow` の他に `color red`、`color blue`、`color green` なども使えます。また、`color chain` とすると鎖ごとの色分け、`color structure` とすると2次構造ごとの色分けが可能です。

(3) ある残基番号のアミノ酸だけ、色を変える

12番目のアミノ酸を、赤にしたい場合は、以下のようなコマンドを打ちます。

```
RasMol> select 12
RasMol> color red
```

12番目から16番目のアミノ酸を、緑にしたい場合、以下のようなコマンドを打ちます。

```
RasMol> select 12-16
RasMol> color green
```

(4) ある鎖だけ選択して色を変える

A鎖の色をオレンジに変えたい場合、以下のコマンドを打ちます。

```
RasMol> select *:A
RasMol> color orange
```

(5) ある分子の近傍だけ選択して、強調して表現する

HEM という分子の周辺7Åにある原子を選択して、太いワイアフレームで表示したい場合、以下のコマンドを打ちます。

```
RasMol> select within(7.0, HEM)
RasMol> wireframe 100
```

また、画面上で原子をマウスでクリックすると、クリックされた原子名が以下のように表示されます。

```
RasMol> (画面上でマウスをクリックする)
Atom: OD1 129 Group: ASN 14 Chain:A
RasMol> (画面上でマウスをクリックする)
Atom:CG 679 Group:HIS 21 Chain:B
```

付録：RasMol 2.7 簡易コマンド・リファレンス

本ページは、RasMol Quick Reference を参考に、部分的に改変・日本語訳したものです
(<http://biochemistry.utoronto.ca/steipe/bioinformatics/tutorials/refcard.pdf>)
RasMol のソフトウェアの入手、より詳細なコマンドの説明は、RasMol の Web サイト：
<http://www.openrasmol.org> をご覧ください。

マウスボタンによる操作

左ボタン	回転 (X 軸、Y 軸まわりの回転)
中ボタン	移動 (X、Y 方向への並進)
Shift キー + 左ボタン	ズーム (拡大、縮小)
Shift キー + 右ボタン	Z 軸まわりの回転
Control キー + 左ボタン	Z 軸に対するクリッピング (Slab)

コマンドラインの編集

Control+**B** あるいは  : カーソルの後退

Control+**F** あるいは  : カーソルの前進

Control+**D** : カーソルにある文字の消去

Delete あるいは **Backspace** : カーソルの前の文字の消去

Control+**P** あるいは  : 一つ前のコマンドの表示

Control+**N** あるいは  : 一つ先のコマンドの表示

一般的なコマンド

load [フォーマット] <ファイル名> : ファイルの読み込み

フォーマットのデフォルトは **pdb** 形式

zap : 読み込んだ分子の削除

exit : RasMol の終了

help [トピック] : オンラインヘルプの表示

選択

select <選択表現> : 分子の一部だけを<選択表現>によって選択する
restrict <選択表現> : 選択した部分だけを表示する。

and もしくは **&&** : 論理積 (AND)
or もしくは **||** : 論理和 (OR)
not もしくは **!** : 論理否定 (NOT)

>> 選択の例 <<

select * : 全ての原子を選択
select Cys : Cysteine の原子を選択
select hoh : 水の原子を選択
select protein : 蛋白質の原子を選択
select *:A : A 鎖の原子を選択
select *.CA : CA 原子を選択

>> 定義済み(predefined)の集合表現を使用する例 <<

select helix : ヘリックスの原子を選択
select hydrophobic : 疎水性アミノ酸の原子を選択
select backbone : 主鎖の原子
select sidechain : 側鎖の原子

>> 残基番号の範囲の選択の例 <<

select 5,10,16 : 5 番目と 3 番目と 16 番目の残基(group)を選択
select 5-16 : 5 番目から 16 番目の残基(group)を選択

>> 論理演算の例 <<

select hydrophobic and sidechain : 疎水性アミノ酸の側鎖の原子
select !HOH && !protein : 水でなく、蛋白質でもない原子

>> 比較演算子の例 <<

select atomno=1203 : 原子番号が 1203 番の原子を選択
select temperature>=800 : 温度因子が 900 以上の原子

>> 距離表現 <<

select within(7.0,HEM) : HEM から 7Å以下の原子を選択

定義済み(predefined)集合表現

at	A か T の塩基	acidic	Asp か Glu	acyclic	環を持たない
aliphatic	脂肪族の AGILV	alpha	C α 原子	amino	アミノ酸
aromatic	芳香族 HFWY	backbone	主鎖の原子	basic	Arg,His,Lys
bonded	他原子と結合	buried	ACILMFVV	cg	C か G の塩基
charged	電荷 RDEHK	cyclic	環を持つ HFPWV	helix	α ヘリックス構造
hetero	HETATM	hydrogen	水素	hydrophobic	AGILMFPWYV
ions	イオン金属	large	REQHILKMFVY	ligand	水でない hetero
medium	NDCPT	neutral	Charged 以外	nucleic	核酸
polar	RNDCEQHKST	protein	蛋白質	purine	A か G の塩基
pyrimidine	C か T の塩基	sheet	β シート構造	sidechain	側鎖の原子
small	Ala,Gly, Ser	solvent	water か ion	surface	RNDEAGHKPSTY
turn	ターン構造	water	水		

表示法（レンダリング）のコマンド

background <色> : 背景の色を指定
set ambient <値> : Depth-cue の背景光の強さを指定
set shadows <真偽> : 影の表示をする・しない
set specular <真偽> : highlight(原子の反射光)の表示をする・しない
set specpower <値> : highlight(原子の反射光)の強さを指定

表示のコマンド

※<値>の大きさは全て 1/250 Å 単位 (例: **spacefill 500** → 半径 2 Å の球で表示)

wireframe <真偽> : ワイアフレーム表示をする・しない
wireframe <値> : <値>の太さのシリンダでワイアフレーム表示をする

spacefill <真偽> : 空間充填球の表示をする・しない
spacefill <値> : <値>の半径で空間充填球の表示をする

backbone <真偽> : バックボーン表示 (Calpha 原子を通るシリンダ) をする・しない
backbone <値> : <値>の半径のシリンダでバックボーン表示をする。

ribbons <真偽> : リボン表示をする・しない
ribbons <値> : <値>の幅のリボン表示をする。

cartoon <真偽> : カートゥーン(厚みのあるリボン)表示をする・しない
cartoon <値> : <値>の幅のカートゥーン表示をする。

label <真偽> : 原子にラベル原子名等の文字列を表示する
label <文字列> : <文字列>を原子にラベル表示する
set fontsize <値> : 文字列のフォントの大きさを<値>に設定する

ssbonds <真偽> : SS 結合を表示する
ssbonds <値> : SS 結合を<値>の太さで表示する
set ssbonds backbone : SS 結合を主鎖の Calpha 原子間に設定する
set ssbonds sidechain : SS 結合を側鎖の硫黄原子間に設定する

hbonds <真偽> : 水素結合を表示する・しない
hbonds <値> : 水素結合を<値>の太さで表示する

monitor <原子番号>, <原子番号> : 2つの原子の間に点線を引き、
距離のラベルを表示
monitor <真偽> : monitor 表示をする・しない
set monitor <真偽> : monitor のラベルを表示する・しない

dots <真偽> : ドットサーフェースを表示する
dots <値> : <値>の大きさの点密度でドットサーフェースを表示

色のコマンド

color <オブジェクト> <色>: 色を指定

<オブジェクト>: 以下から選択できる。省略した場合は、全てが対象となる。

atoms bonds backbone ribbons labels hbonds
ssbonds dots axes

<色>:

定義済みの色

blue black cyan deeppink firebrick forestgreen
grey green greenblue maganta orange pink purple
red redorange skyblue violet white yellow

原子のカラーリング法

cpk	炭素:灰、酸素:赤、窒素:青	amino	アミノ酸ごとの色
shapely	アミノ酸ごとの色	group	残基番号順に青→赤
chain	鎖ごとに別の色を付ける	structure	ヘリックス magenta シート yellow
temperature	温度因子に従って青→赤	charge	温度因子に従って赤→青

回転・拡大操作などのコマンド

rotate <軸> <回転角(°)>: <軸>を回転軸として<回転角>° 回転

translate <軸> <値(Å)>: <軸>の方向に<値>Åだけ並進移動

<軸>: **x** あるいは **y** あるいは **z**

>>回転・並進の例<<

rotate x 30 : x 軸に対して30度回転

translate x 2.5 : x 軸に対して2.5Å並進移動

zoom <値(%)>: <値> (%) に拡大。zoom 100 がそのまま。

slab <値(0~100)>: z 軸に垂直な面で切断表示する。切断面の位置を<値>で指定。

分子の背中を 0、分子の手前を 100 とする。

reset : 回転、並進、拡大、切断をリセットし、初期表示に戻す。

出力コマンド

画像ファイルを出力

write <フォーマット> <ファイル名> : ファイルに画像を出力
<フォーマット>

gif : gif 画像フォーマット
ps : PostScript 画像フォーマット
epsf : Encapsulated Postscript 画像フォーマット
monops : Monochrome Postscript 画像フォーマット
bmp : Microsoft BMP 画像フォーマット
pict : Apple PICT 画像フォーマット
ppm : Portable Pixmap 画像フォーマット
ras : Sun raster 形式の画像フォーマット

画像以外のファイルを出力

write vectps <ファイル名> : Postscript 形式の線画フォーマットで出力。
※ワイアフレーム、空間充填、バックボーン表示のみ対応。

write molscript <ファイル名> : Molscript のスクリプトファイルを出力

write vrml <ファイル名> : VRML 形式のファイルを出力。
※ ワイヤフレーム、空間充填の表示のみ対応。

write phipsi <ファイル名> : 主鎖の角度 ϕ 、 ψ の値をテキスト形式で出力

write ramachan <ファイル名> : ラマチャンドラン・マップ (ϕ 、 ψ の 2 次元分布図)
をテキスト形式で出力

write script <ファイル名> : 現在の表示を再現するためのコマンド群を、出力する。
※一度、RasMol を終了したあと、ターミナルのコマンドラインから、スクリプトファイルを指定して **rasmol -script** <ファイル名> と実行すると、全く同じ表示が再現される。

その他のコマンド

structure : 2 次構造の情報を表示
connect <真偽> : 共有結合の接続を再計算する・しない
show information : 構造の様々な情報を表示
show sequence : 配列を表示
show symmetry : 結晶の空間群の情報を表示