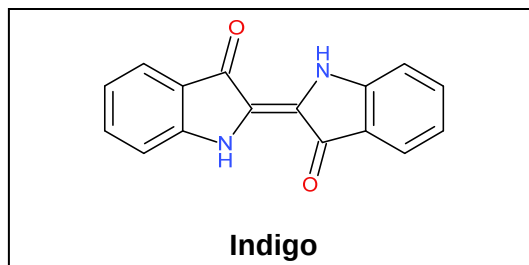


本日の演習内容

フリーソフトである RasWin を利用して化学構造式を立体的に描画します。下記の Indigo 分子とタンパク質(光合成光反応中心)の構造を描画してください。

課題 1

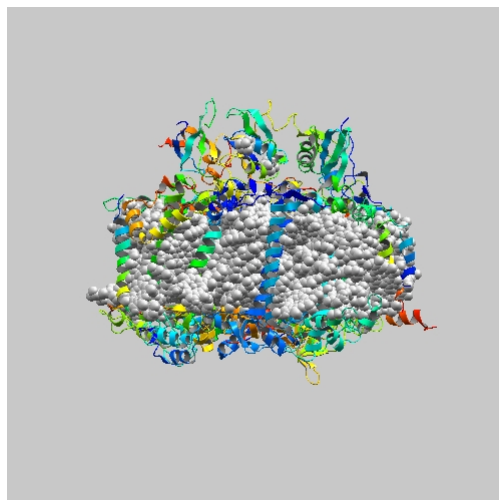


1. BIOVIA Draw を起動し、インジゴの分子構造を二次元的に描画し保存する。
2. 上記の図を molfile (.mol) で save。ただし、ファイル名は半角英語で。
3. RasWin を起動し、上記 2 のファイルを読み込む。File をクリック open、「MDL Mol File Format」を選択。
4. 別紙の RasWin コマンドを参考にし、分子構造を描画する。
5. 作成した分子構造は、Export→PICT 形式を選択し、名前をつけて画像ファイルとして保存する。
6. 作成した画像ファイルをパワーポイントに貼り付けて提出する。

課題 2

課題 1 が完了したら、indigo の図は File の Close で消す。タンパク質のデータファイル(Protein Data Bank 形式 - PDB⁽¹⁾)を用いて、タンパク質の構造を描く。見本および RasWin コマンドを参考にして描いてみる。提出方法は、課題 1 と同様。

注釈(1): http://www.pdbj.org/index_j.htmlのサイトより、構造解析された様々なタンパク質のデータをダウンロードし(X線やNMR)、利用することができる。登録されているデータは、原子の(x,y,z)座標とそれらの原子の結合情報からなる「Protein Data Bank(=PDB)」形式である。このPDBファイルはワード等で開くこともでき、中身を精査することが可能で



光合成光反応中心の X 線構造解析 (PDB-ID=1JB0)。

RasWinよく使うコマンド

注: 日本語名のフォルダーに読み込みファイル(PDB)があると開かない。必ず、英語名のフォルダーに読み込みファイルを入れること。

background white: 背景の色の変更
wireframe on (or off): 分子をワイヤーフレームで表示(or 消去)
wireframe 150: 適当な数字を入力することで線の太さを変更
spacefill 20: スペースフィルモードで表示(後ろの数字は大きさ)
color green: 選択した原子や分子の配色の変更
color blue: 選択した原子や分子の配色の変更
color red: 選択した原子や分子の配色の変更
zoom 200: 適当な数字で拡大表示
select all: すべての原子を選択
select nitrogen: 窒素原子を選択

select his: ヒスチジン残基を選択
select hetero: ヘテロ分子を選択
select helix: α -ヘリックスを選択
select *B: B-ブランチを選択

課題1のコマンド入力例:

[background white]→[select all]→[wireframe 20]→[spacefill 50]→[select nitrogen]→
[color green]

課題2のコマンド入力:

例えば 1JB0 ファイル(光合成光反応中心)からのクロロフィル色素(PDB ファイル内分子番号=1502)とヒスチジン残基(PDB ファイル内分子番号=54)の配位結合の状態を表示するには...

ファイルの読み込み

- (1) background white: 背景を白へ
- (2) select *L: L-ブランチのみを表示
- (3) ribbon: ヘリックスをリボンで表示(他 cartoons etc)
- (4) color pink: L-ブランチの色をピンクへ
- (5) select 54L: L-ブランチの 54 番目のヒスチジンを選択
- (6) wireframe 100: 54 番目のヒスチジンを表示
- (7) color green: 54 番目のヒスチジンを緑色へ
- (8) select 1502: 1502 番目のクロロフィル色素を選択
- (9) wireframe 75: クロロフィル色素の表示
- (10) color blue: クロロフィル色素を青色へ
- (11) select nitrogen: 窒素原子の選択
- (12) color red: 窒素原子を赤色へ
- (13) select 1502 and magnesium: クロロフィルとMg原子を選択
- (14) spacefill: 選択したMg原子をスペースフィルモードで表示
- (15) color orange

課題 3 マスマティカによる簡単なグラフの描き方

1

$\sin(x)$ と $\cos(x)$ と $\tan(x)$ を同じグラフに重ねてプロットしてみよう。

`Plot[{f(x), g(x), ...}, {x, a, b}]`

という形になる。

2

データのプロット。たとえば、

`data={{0,1},{0.4,0.8},{0.8,0.4},{1,0},{0.8,-0.4},{0.4,-0.8}}`

をプロットしてみる。

`ListPlot[...]`

を使う。

点の大きさを変えてみよう。(a の値は 0.1 以下でよい)

`PlotStyle->PointSize[a]`

点をつないでみよう。

`PlotJoined->True`

`Table[expr,{i,Subscript[i, min],Subscript[i, max],di}]`

完成したら、ファイルをメールに添付して提出すること。

送り先 : [ynagasa あつと fc.ritsumei.ac.jp](mailto:ynagasa@fc.ritsumei.ac.jp)

- メールタイトルは” 基礎演習 2 レポート：氏名と学生証番号” とすること。
- 提出ファイルの最初のページの右上には必ず氏名と学生証番号を記入すること。
- ファイル名は “氏名+171122” とする。(例：立命太郎 171122)
(「.xlsx」等の拡張子は自動で付くので、自分で書き込む必要はない)
- ファイル名の「氏名」以外は必ず半角。
- 最終締め切り：2017 年 11 月 28 日 (火曜)。
- 日常点評価の提出課題は定期試験と同等の意味があるので真剣に取り組むこと。