

ディレクトリー

research_prac_home/Coot/Coot_tutorial2008_8

ファイル

tutorial.pdb

rnasa-1.8-all_refmac1.mtz

monomer-3GP.pdb

PDB 座標の読み込み

Menu → File → Open Coordinates

Filter

tutorial.pdb ファイルを指定

MTZ ファイルの読み込み

Menu → File → Auto Open Mtz MTZ ファイルを指定

Filter

rnasa-1.8-all_refmac1.mtz を指定する。

マウス

左ボタン+マウสดラッグ

回転

control キー+ 左ボタン+マウสดラッグ

並進

右ボタン+マウสดラッグ

拡大、縮小

control , shift キー+ 右ボタン+マウสดラッグ Z 軸回転

control + 右ボタン+マウสดラッグ上下 スラブ

control + 右ボタン+マウสดラッグ左右 Z スクリーン

中ボタン+マウスクリック

中心原子の選択

shift キー+ 左ボタンクリック

原子のラベル

ホイール前進

マップのレベル上昇

ホイール後進

マップのレベル降下

中心原子の変更

- a) マウス 中マウスボタン
- b) キーボード スペース 次の残基
 shift + スペース 前の残基
- c) Menu -> Draw -> Go to Atom chain, residue, atom を指定
- d) Menu -> Draw -> Sequence view -> model を選ぶ -> 配列上の残基をクリックする。

キーボード

スペース	next residue
shift + スペース	previous residue
q	X 回転 プラス
w	X 回転 マイナス
e	Y 回転 プラス
r	Y 回転 マイナス
t	Z 回転 プラス
y	Z 回転 マイナス
i	Y 連続回転
n	zoom out
m	zoom in
d	slim clip
f	fatten clip
+	ρ -map レベルアップ
-	ρ -map レベルダウン
u	undo last navigation move

モデルとマップの表示操作

Menu -> Display manager

Maps

Display	表示、非表示
Scroll	電子密度のレベル調整可

Molecules

Display	表示、非表示
Active	モデルの座標変更可

配列の表示

Menu → Draw → Sequence view → model を選ぶ → 配列上の残基をクリックする。

Cell と対称分子の表示

Menu → Draw → Cell & symmetry

Symmetry	yes
Show Unit Cell	yes
OK	

ヘリクスの発生

- 1) Chain A, residue 20 を中心にする。
- 2) Menu → Calculate → Model/Fit/Refine → Select Map → FWT PFWT map を選ぶ
- 3) Menu → Calculate → Other modeling tool → Place Helix Here
電子密度に α -ヘリクスモデルが置かれる。

ヘリクスの N 末または C 末に 1 残基を発生させ、regularize する。

- 1) Menu → Calculate → Model/Fit/Refine → Add Terminal Residue
十字カーソルを末端の残基にヒットする。
- 2) Menu → Calculate → Model/Fit/Refine → Regularize Zone
十字カーソルを末端の残基とヘリクスの真ん中付近の残基にヒットする。

ロータマー Rotamer, Auto Fit Rotamer

- 1) Chain A, residue 30 , Tyr を中心にする。
- 2) Menu → Display manager で chain A が active であることを確認する。
- 3) Menu → Calculate → Model/Fit/Refine → Rotamers ... で、Rotamer 2 を選択し、accept する。

- 4) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Auto Fit Rotamers 十字カーソルを Tyr 30 側鎖をヒットする

ヘリクスの residue 17, mutation, 側鎖のモデルフィット, , Auto Fit Rotamer

- 1) HELIX molecule, Chain A, residue 17 , Ala を中心にする。
- 2) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Simple Mutate ...
十字カーソルを residue 17 にヒットし、 Asp 変える。
- 3) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Auto Fit Rotamers 十字カーソルを Asp 17 側鎖をヒットする

ヘリクスの residue 14, mutation, 側鎖のモデルフィット, Edit Chai Angles

- 1) HELIX molecule, Chain A, residue 14 , Ala を中心にする。
- 2) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Mutate & Auto Fit...
十字カーソルを residue 14 にヒットし、 Glu 変える。
- 3) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Edit Chi Angles 十字カーソルを Glu 14 側鎖をヒットする。キーボード 0, 1, 2, 3 を押してマウスを操作する。それぞれ全体、chi1, chi2, chi3 に対応する。

ヘリクスの residue 14 側鎖の Real space refine zone

- 1) HELIX molecule, Chain A, residue 14 , Glu を中心にする。
- 2) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Real Space Fit Zone
十字カーソルを res 13, res 15 の残基にヒットする。

1 残基の移動と real space refinement

ヘリクス残基 14 の N, Ca, 側鎖、CO 0.3Å くらいずらす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Rotate/Translate Zone

十字カーソルを res 14 に 2 回ヒットする。ヘリクス残基 14 の N, Ca, 側鎖、CO 0.3Å くらいずらす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Real Space refinement

十字カーソルを res 13, res15 にヒットする。

2 残基の移動と real space refinement

ヘリクス残基 13, 14 の N, Ca, 側鎖、CO 0.3Å くらいずらす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Rotate/Translate Zone

十字カーソルを res 13, 14 にヒットする。ヘリクス残基 13, 14 の N, Ca, 側

鎖、C0 0.3Å くらいずらす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Real Space refinement

十字カーソルを res 12, res15 にヒットする。

1 残基の移動と Regularize

ヘリクス残基 14 の N, Ca, 側鎖、C0 0.3Å くらいずらす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Rotate/Translate Zone

十字カーソルを res 14 に2回ヒットする。ヘリクス残基 14 の N, Ca, 側鎖、C0 0.3Å くらいずらす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Regularize zone

十字カーソルを res 13, res15 にヒットする。

1 残基の移動と Rigid Body Fit, Regularize

ヘリクス残基 14 の N, Ca, 側鎖、C0 0.3Å くらいずらす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Rotate/Translate Zone

十字カーソルを res 14 に2回ヒットする。ヘリクス残基 14 の N, Ca, 側鎖、C0 0.3Å くらいずらす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Rigid body fit zone

十字カーソルを res 13, res15 にヒットする。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Regularize zone

十字カーソルを res 13, res15 にヒットする。

1 原子 move と real space refine

ヘリクス残基 14 の C0 の O を動かす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Rotate/Translate Zone

十字カーソルを res 14 に2回ヒットする。

Control + 左マウスボタンを押し、res14 O 原子を動かす。

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Real Space refinement

十字カーソルを res 13, res15 にヒットする。

ペプチド主鎖 (ϕ , ψ) の変更と Real Space Refinement

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Edit backbone torsion

十字カーソルを res 14 にヒットする。

Rotate peptide, Rotate carbonyl を変更する。

Menu -> Calculate -> Real Space refinement

十字カーソルを res 13, res15 にヒットする。

変更した座標を戻す

Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Undo

PDB 座標の出力

Menu -> File -> Open Coordinates

Save coordinates

tutorial080809.pdb ファイルを指定

State file の出力、セッションの再会

Menu -> File -> Save state

Save coordinates

coot_tutorial080809.scm ファイルを指定

Coot セッション中止

Menu ->File -> Exit

Coot セッション再会

coot

Menu -> Calculate -> Run Script ...

ファイル coot_tutorial080809.scm を指定

Measure

Menu -> Measure -> Environment Distant... show residue on , label on

中心原子付近の距離が表示される。

Menu -> Measure -> Pointer Distant... show on

中心原子まわりの距離が表示される。

Menu -> Measure -> Distances & Angles -> Distance

十字カーソルを原子 2 個にヒットする。

Validate

a) ラマチャンドランプロット

Menu -> Validate -> Ramachandran Plot 分子を選択

メインウィンドウで中心原子をヒット 緑の四角または三角で表示される。

四角 非グリシン残基、三角 グリシン

ラマチャンドランプロットで、四角か三角を左クリックする。

キーボード スペースキーで中心原子を移動

b) キラル体積

Menu -> Validate -> Incorrect Chiral Volume 分子を選択

c) 2分子 KleyWegt 比較

Menu -> Validate -> KeyWegt Plot 分子を2個選択

first structure A, Second structure B

d) geometry analysis

Menu -> Validate -> Geometry Analysis 分子を選択

e) ペプチド結合の解析

Menu -> Validate -> peptide omega analysys 分子を選択

赤いバーをヒットする。

f) ロータマー解析

Menu -> Validate -> Rotamer 分子を選択

g) Density Fit 解析

Menu -> Validate -> Density Fit Analysis 分子を選択

赤いバーをヒットする。

Res 89 ロータマー Rotamer, Auto Fit Rotamer

1) Chain A, residue 89 , Phe を中心にする。

- 2) Menu -> Display manager で chain A が active であることを確認する。
- 3) Menu -> Validate -> Density Fit Analysis で、chain A, Phe89 に fit が悪いことを確認する。
- 4) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Analysis accept する。
- 5) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Real Space Refine
- 6) Menu -> Validate -> Density Fit Analysis で、chain A, Phe89 に fit がよいことを確認する
- 7) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Analysis -> undo
- 8) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine Real Space Refine -
十字カーソルを Phe にヒットする。
Phe の先頭原子をマウス左ボタンで動かす。

十字カーソルを res 89 側鎖をヒットする

Res 41 Back bone real Space Refinement

- 1) Chain A, residue 41 , Glu を中心にする。
- 2) Menu -> Validate -> Density Fit Analysis で、chain A, Glu41 で fit が悪いことを確認する。
- 3) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Real Space Refine Res 40, Res 42
- 4) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Edit Backbone Torsion Res 41
- 5) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Real Space Refine Res 40, Res 42

Unmodelled Blob 3 SO₄ ion

- 1) Menu -> Validate -> Unmodelled blob -> Find blobs blob 3 を選ぶ。
- 2) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Place Atom at pointer -> S04
- 3) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Real Space Refine S04j をヒット

Unmodelled Blob 2

- 1) Menu -> Validate -> Unmodelled blob -> Find blobs blob 3 を選ぶ。 Unmodelled Blob 3
- 2) Menu -> File -> Get Monimers ... monomer-3GP.pdb を指定する。

- 3) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Delete -> Hydrogen in residues
- 4) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Rotate/Translate/Zone -> 3GP を 2 回クリックする。
- 5) Menu -> Calculate -> Model/Fit/Refine -> Real Space Refine 3GP を 2 回クリックする。
- 6) Menu -> Calculate -> Merge Molecules Monomer-3GP を分子 0 に組入れる。

Unmodelled Blob 1 A chain, C 末 93 に、2 残基付加する。

- 1) Menu -> Calculate -> Fit Loop 94-96, QTC
- 2) Menu -> Calculate -> Other Modelling Tools -> Add OXT to Residue

水分子を探す

- 1) Menu -> Calculate -> Find Waters
- 2) Menu -> Measure -> Environment Distance Show on, Label on
- 3) Menu -> Draw -> Go To Atom Chain E res 1
- 4) キーボード space