

# 蛋白質 3次元構造グラフィックツール RasMol の使用解説

吉 武 新 次\*

Introduction to RasMol

Shinji YOSHITAKE\*

---

**Key words** : RasMol, PDB, Protein 3D Structure, Molecular Graphics

---

現在本会誌にシリーズ連載中の「立体構造で見る凝固線溶蛋白質の作用機構」ではプロテインデータバンク (PDB) に登録されている蛋白質の座標データから構築される 3次元構造に基いた説明が多くなされておりますが、この構造モデルを各自のパーソナルコンピュータ上で見る、動かす、あるいは画像コピーをとるためのソフトウェアが RasMol です。このソフトウェアはすでに世界中で使用されており、RasMol というキーワードで日本の website を検索しても多くのサイトにリンクすることから、国内の研究者あるいは教育の場においても汎用されているようです。インターネット上の RasMol のホームページにはダウンロード方法を含む英文の詳細な説明、マニュアルもあり、使用上の Q&A 等充実した内容が掲載されております。しかしながら実際に使い始め、ある程度使い慣れると、例えばある構造モデル表示を細かに変更したいと思った時、マニュアルを読むだけでは判りづらいことに直面しました。そこで単純に使用者の志向に沿った筆者の経験を付加して平易に日本語で紹介するということで上記英語による説明との重複を承知で敢えてこの場を借りて解説することにいたしました。RasMol では画

像表示を任意に調整する場合すべてキーボードからコマンドを入力しなければなりませんので、最新のソフトウェアのプルダウンメニューとマウス操作に慣れてしまった方々には面倒という印象を与えることは避けられないと思いますが、パーソナルコンピュータで自在に操作可能、しかも freeware である点を考慮すれば些細な問題でしかないと思っております。以下、ソフトウェアのダウンロードから操作法までの一連の手順を how-to に徹して紹介いたします。尚、筆者の使用経験に基き、本解説ではハードウェアの準備として MSWindows 95 系統のパーソナルコンピュータ (RAM 40 M バイト、ディスクの空き 0.6 GB 程度、スクリーン解像度 800 X 600 ピクセル)、適当なブラウザを介してインターネットへ接続していることを前提としますが、Mac その他のシステムでも使用可能のようです。またクリック操作は特に指示しない限り左クリックです。

## 1. プロテインデータバンク (PDB) データファイルのダウンロード

RasMol はプロテインデータバンク (PDB) に登録されている蛋白質、核酸、あるいは低分

---

\*エーザイ株式会社 渉外室 (〒112-8088 東京都文京区小石川 4 丁目 6-10)

Corporate Licensing & International Business Development Eisai Co., Ltd. (4-6-10 Koishikawa, Bunkyo-ku, Tokyo 112-8088, JAPAN.)

子の座標データファイルを読み込みコンピュータ画面上にその構造を表示しますので、まず目的とする蛋白質の PDB データファイルを準備する必要があります。PDB へは [www.rcsb.org/pdb/](http://www.rcsb.org/pdb/) で接続でき、PDB 概説: [www.rcsb.org/pdb/help-general.html#formats](http://www.rcsb.org/pdb/help-general.html#formats) (この中には RasMol についても簡単な紹介があります)、データファイルダウンロード法: [www.rcsb.org/pdb/downloading.html](http://www.rcsb.org/pdb/downloading.html) も説明してありますので必要に応じてこれを参照してください。

① [www.rcsb.org/pdb/](http://www.rcsb.org/pdb/) の最初の画面の右側 Search の Enter a PDB ID 欄に目的とする蛋白質固有の 4 桁 ID 番号 (大文字でも小文字でも可) を記入、Explore ボタンをクリックします。PDBID 番号を知るには検索機能 Search-Lite: simple keyword search 欄にキーワードたとえば [plasminogen](#) のように入力しクリックすると関連する PDBID 番号ならびにデータ概要リストが表示されます。SearchFields: advanced search を用いても同様な検索が可能です。このリストから目的とする ID 番号を選択します。

② Summary Information ページが現れます。次に画面左側の [Download/DisplayFile](#) を選択します。

③座標データは Display the Structure File 欄の枠内の file format PDB | complete with coordinate 欄の [HTML](#) をクリック、あるいは Download the Structure File 下部の枠内の file format PDB | compression none 欄の [X](#) をクリックします。後者の場合、指示に従ってハードディスク C: あるいはフロッピーディスク A: に保存します。ファイルのサイズは数百キロバイトですから FD にも十分に収まります。ファイルの拡張子は .pdb になります。前者の HTML をクリックした場合、ダウンロードに時間を要しますが、画面に先ず PDB データの詳細(前半が研究者名、文献、構造概略等々、後半が原子座標データ)が画面に表示されます。データファイルをダウンロードする場合、[Save](#)

[full entry to disk](#) をクリックし、上と同様に保存します。RasMol による構造モデル表示の詳細調整を行なう場合、アミノ酸残基を構成する原子の分子内通し番号を知る必要があります。その場合、折りに触れてこの詳細データを参照しますので、必要に応じてプリントアウトします。但し、印刷用紙の方向を A 4 横とする必要があるため印刷枚数が多くなり注意が必要です(ちなみに tPA のプロテアーゼドメイン 1 RTF、原子数約 2,400 は全 68 ページになります。殆どの場合、印刷はトナー節約モード、使用済み用紙の裏側を使っております)。

④これはデータを良く理解するためのオプションですが、②の Summary Information ページの左側 [Sequence Details](#) をクリックします。サマリーの中に一つのデータファイル中のペプチド鎖数に関する概略情報が記載されている点が重要です。例えば一本鎖 tPA プロテアーゼドメイン・阻害剤複合体 1 BDA を例にとりて説明すれば、Overview 欄に Chains ||1 BDA : A,1 BDA : B,1 BDA : C,BDA : D という表示があります。これは 1 BDA データファイル中には 4 本のペプチド鎖が含まれているということであり、A, B がプロテアーゼ蛋白質、C, D は DNS-Glu-Gly-Arg クロロメチルケトン阻害剤配列を表わしています。1 BDA をそのまま RasMol で表示した場合、画面に一見蛋白質二量体のようなモデルが表示されます。1 本のペプチド鎖のみを選択して表示する場合には、A, B のようにこのファイルに記載されているペプチド鎖表示で指定しなければなりません。この他 PDB データファイル情報の要約は PDBsum ([www.bibochem.ucl.ac.uk/bms/pdbsum/](http://www.bibochem.ucl.ac.uk/bms/pdbsum/)) からも得ることができます。

## 1. RasMol のダウンロード

RasMol は [www.umass.edu/microbio/ras-mol/](http://www.umass.edu/microbio/ras-mol/) からダウンロードできます。現在使用できる RasMol には RasMol 2.6 Beta -2 a と RasMol 2.7.1 の 2 種があり、それぞれの完全なマ

ニュアルも用意されています。筆者はもっぱら 2.7.1 を使用しましたが、2.6 beta と比較して細かい点で改良がなされています。通常どおりセットアップした場合、画面上に表示されている構造をそのまま印刷する機能が 2.6 beta では作動しますが、2.7.1 ではうまく機能しない点が気になった程度でした。以下、2.7.1 および 2.6 beta 2 a のダウンロード法を説明します。

① 上記 RasMol ホームページにアクセスします。ページ半ばにある [You can download RasMol here and...](#) をクリックします。

② [Getting & Installing RasMol](#) ページが表示されます。画面下半分にある [RasMol 2.7 and its full documentation](#) をクリックします。

③ [README RasMol 2.7.1](#) ページが表示されます。このページには RssMol の著作権等に関する記載があります。また Introduction の部分には 2.7.1 における前バージョンからの変更・改良点が概略記載されています。

④ このページの最上部 | [Installation Instructions](#) | をクリックします。Installation Instructions RasMol 2.7.1 ページが表示され、Obtaining RasMol v 2.7.1 項目のリンクサイトをクリックします。

編集者注：Mac の場合は、Obtaining RasMol v 2.7.1 項目の下方に、[RasMac PPC 32 BIT. bin.gz](#) 等 6 種類あるので、適当なものをダウンロードする。

⑤ FTP Directory : <ftp://ftp.berstein-plus-sons.com/software/RasMol 2.7.1> 画面が表示されます。Windows 対応コンピュータを前提としていますから、[RasMol.MSWIN](#) をクリックします。

⑥ 同じく FTP Directory : <ftp://ftp.berstein-plus-sons.com/software/RasMol 2.7.1> 画面になり、[raswin.exe.gz](#) をクリックします。注意、文字コードセットを判別できません'gzip' という表示が出ますが OK をクリックします。そうするとファイルの転送指示が表示されますのでハードディスク C: あるいは

フロッピーディスク A: を選択します。raswin.exe.gz というファイル名で転送され、サイズは 164 K です。

⑦ さて、この raswin.exe.gz ファイルは gzip 形式で圧縮されていますのでインストールに先立ち解凍します。そのために解凍ソフトウェアを別途ダウンロードする必要がありますが、筆者は Aladdin Expander 5.0 というフリーウェアを使用しました。<http://www.aladdinsys.com/expander/> にリンクします。Expander Freeware ページ中の [Aladdin Expander for Windows](#) をクリックします。

編集者注：Mac の場合は、[StuffIt Expander for Macintosh](#) をクリックする。

次に Aladdin Expander 5.0 for Windows 95/98/NT 4.0 ページ中の Log-in and download Aladdin Expander 5.0 for Windows 空欄に必要事項を記入し、Go to Download をクリックします。保存場所を C: ¥alex 50.exe のように尋ねられますのでそのまま OK をクリックしてゆけばダウンロードは完了です（サイズは 1440 K）。次に Aladdin Expander のインストールになりますが、デスクトップのファイル中の alex 50.exe をダブルクリックすると、自動的にインストールが始まり、ダイアログボックスが表示されます。Destination Directory: C/:... という表示が現れますので問題なければ OK して先に進みます。デスクトップ上に自動的に Aladdin Expander 5.0 というショートカットアイコンが作製されてインストール完了です。

⑧ この後の RasMol のインストールは簡単で raswin.exe.gz ファイルを Aladdin Expander 5.0 のショートカットアイコン上にドラッグ・アンド・ドロップするだけです。そうすると自動的に解凍されデスクトップ上に raswin.exe というアイコンが作製され、インストール完了です。

⑨ RasMol 2.6 beta 2 a のダウンロードも同様に行ないます。ファイルは圧縮されておりま

せんでインストールはより簡単です。②の画面から [Download RasWin for PC/Windows](#) をクリックします。Download RasWin 2.6 beta-2 a for PC/Windows Get 32-bit RasWin for Windows 95 or Windows NT. をクリックします。

編集者注: Mac の場合は、②の画面から [Download RasMac for Macintosh/PPC](#) をクリックし、[Get rmc 26 b 2 a.sit.hqx](#) をクリックする。

⑥と同様に保存すると C:rw 32 b 2 a.exe になります。ファイルをダブルクリックすると自動的に解凍されプログラムがインストールされます。⑧のようにデスクトップ上にショートカットメニューを作製すると便利です。

⑩ RasMol マニュアル、コマンド一覧表のダウンロード法を紹介します。2.7.1 用は③の README RasMol 2.7.1 画面上部の | RasMol Manual | をクリックします。Manual RasMol 2.7.1 が表示され、マニュアルが得られます。また、この画面の最上部にある 3 種のリンクサイト表示 [IUCr](#) [CIF](#) [RasMol](#) から RasMol をクリックします。Documentation RasMol 2.7.1 画面になり、RasMol に関するドキュメントリストが表示されます。このうち [manualUS.rtf.gz](#) [refcardA 4.rtf.gz](#) を選択して右クリックし、リンクを名前を付けて保存を選択しディスクに保存します。すべて gzip ファイルで圧縮されていますので⑧のように解凍します。自動的に Word 文書ファイルが生成し、マニュアル、コマンド一覧が得られます。2.6 beta 2 a 用は②の画面の 2 ページ目にあるカラー表示された RasMol Reference Manual 欄の [hypertext form of the Reference Manual](#) あるいはその下の [frame version of the 2.6 beta 2 reference manual](#) をクリックすれば得られます。さらにその下の [RasMol Quick Reference Card](#) をクリックすればコマンド一覧が得られます。以上で RasMol の操作に関する準備がほぼ全て整ったことになります。

### 3. RasMol 操作法

#### ①操作開始:

デスクトップ上の RasMol ショートカットアイコンをダブルクリックします。RasMol グラフィクス画面 (以下 G 面と略) が表示され、通常画面は黒に設定されています。画面上部タスクバーに [File](#) | [Edit](#) | [Display](#) | [Colours](#) | [Options](#) | [Export](#) | [Help](#) メニューが表示されています。RasMol のもう 1 つの重要な画面が RasMol Command Line 画面 (以下 L 面と略) で、ウィンドウ画面の最下部のタスクバーに [RasMol Command Line](#) 表示があり、これをクリックすれば白い画面が立ち上がります。L 面の RasMol> プロンプトに続いて目的とするコマンドを英語入力すればグラフィックス表示の調整が可能になります。コマンド入力する場合、入力終了後必ずリターン (エンター) キー (以下 ▽ と略) を押します。英語の綴りを間違えて入力しても error メッセージが表示されますからご注意ください。G 面と L 面の切り替えは画面をどちらかをクリックするだけで行うことができます。

#### ②構造モデルを表示する:

G 面上部のタスクバーの [File](#) メニューをプルダウンし Open → ファイルの場所を選択し、PDB データファイルが保存してあるディスクを指示すれば G 面に蛋白質の構造モデルがワイヤフレーム (ワイヤーモデル) 表示されます。

既に述べましたように 1 種の PDB データファイル中には複数のペプチド鎖が含まれている場合があります。この中から特定のペプチド鎖を表示する方法を、前述の tPA・阻害剤複合体 1 BDA を例にとって説明いたします。G 面には tPA プロテアーゼドメイン二量体のようなモデルが表示されています。これから A 鎖を全て選択し表示する場合 L 面 RasMol>select \*A ▽ RasMol>save temp.pdb ▽ RasMol>zap ▽ RasMol>load temp.pdb ▽ のように入力します。最初のコマンド入力後 L 面に 2562

atoms selected という表示が現れます。第2番目の入力は選択された A 鎖の PDB 座標データを一時的に保存するためのサブデータファイルを作製したことを表わします。この入力の代わりに RasMol>save A:1 bdachainA.pdb ▽ と入力すると座標データはフロッピーディスクに保存され、何度も使用することができます。Zap は現在の G 面の表示をすべて御破算にするコマンドで、G 面は黒色背景のみになります。Load はデータファイルを読み込むコマンドで、これで G 面には A 鎖のワイヤフレーム表示が現れます。保存したディスク中のサブデータファイルを読み込むには RasMol>load A:1 bdachainA.pdb ▽ のように入力します。A 鎖と阻害剤配列を同時に表示するには RasMol>select \*A, \*C▽ という入力になります。また、例えばヒトアンチトロンビン III・ヘパリンペプタサッカライド複合体 1 AZX では 2 本のペプチド鎖は I, L で規定され、ペプタサッカライドの座標データはそれぞれのペプチドに統合されたデータファイルとして登録されています。従ってこの場合には RasMol>select \*I▽ と入力すればペプチド鎖およびペプタサッカライド座標データが全て選択されます。この他 PDB 座標データには主ペプチド鎖以外の分子、例えば水分子、燐酸イオン、糖鎖等のデータも含まれており、これらヘテロ分子のみをまとめて表示するには RasMol>select hetero ▽ RasMol>cpk▽ と入力し、ヘテロ分子が CPK (空間充填) モデルで表示されます。応用として 1 BDA に対して RasMol>select \*A, \*C▽ RasMol>save temp.pdb ▽ RasMol>zap ▽ RasMol>load temp.pdb ▽ RasMol>select \*C▽ RasMol>cpk と入力するとワイヤーモデルで表示されたプロテアーゼドメインに CPK モデルで表示された阻害剤が結合した構造が表示されます。

NMR 法により決定された構造の PDB データファイルには複数の構造モデルが含まれている場合があります。例えばウロキナーゼ N 末端ドメイン 1 URK には 12 の構造モデルが含ま

れています。NMR 構造モデルは通常 1, 2, 3, 4 のようなアラビア数字で区別されていますので、これから特定のモデルを選択表示するためには RasMol>select \*/1▽ のように入力した後、上と同様に save, zap, load コマンドを実行すれば選択表示できます。

### ③ G 面背景の配色を変える：

L 面 RasMol>background white▽ と入力すれば L 面は白になります。表示可能な色はマニュアルに記載のように Black, Blue, BlueTint, Brown, Cyan, Gold, Grey, Green, GleenBlue, GreenTint, HotPink, Magenta, Orange, Pink, PinkTint, Purple, Red, RedOrange, SeaGreen, SkyBlue, Violet, White, Yellow, YellowTint の計 24 色となっており、RasMol>background に続き上記カラー▽ を入力すれば色調変更できます。

### ④ 構造モデルの回転、並進、拡大、縮小：

すべてマウス操作のみで選択可能です。画面を XY 平面、画面に垂直軸を Z とすると、X 軸、Y 軸の回転は G 面を左ドラッグ、Z 軸まわりの回転はシフトキーを押しながら右ドラッグになります。XY 面上で構造モデルを上下左右に移動するには右ドラッグになります。拡大・縮小はシフトキーを押しながら左ドラッグになります。

### ⑤ ペプチド鎖の表示法を変更：

Wireframe, Backbone, Sticks, Spacefill, Ball&Stick, Ribbons, Strands, Cartoons の計 8 種で、G 面タスクバー Display をプルダウンし上記のどれかを選択すれば対応する表示になりますので試行して下さい。この他マニュアルには記載されていますが、このプルダウンメニューに含まれていない表示法がトレース (チューブモデル) 表示です。これは backbone 表示同様ポリペプチド鎖のおおまかな折り畳まれ方を知るのに有用な方法で、backbone 表示が角張った表示であるのに対しトレースは滑らかな表示になります。ただしトレースラインはポリペプチド鎖の  $\alpha$  炭素を厳密に繋いだ線ではあ

りませんの注意は必要です。表示をトレースに変更するにはまず wireframe 表示を消去するため RasMol>wireframe off ▽そして RasMol>trace ▽と入力すれば表示が変更されます。ドットサーフェス表示するためには RasMol>dots 50 ▽のようにすると現在 G 面に表示されているペプチド鎖表示の上にドットが上描きされます。Dots の後の数字はドットの密度を表わし、数が大きければ高密度になります。

#### ⑥ペプチド鎖の線の太さの変更:

Wireframe, backbone, trace は線を基調とした表示ですが、その線の太さを調整できます。RasMol>wireframe 50 ▽, RasMol>backbone 50 ▽, RasMol>trace 100 ▽のように入力すると数字に対応して線の太さが変更されます。ここで入力される数字は RasMol 単位として認識され、250 RasMol 単位が1オングストロームに相当します。Ribbon の幅も同様に調整できます。蛋白質の場合、 $\alpha$ ヘリックス、 $\beta$ シートは380に、ターン、ランダムコイルは100に設定されています。RasMol>ribbon 500 ▽のように入力すれば幅が変更されます。

#### ⑦ペプチド鎖の色調変更:

次に線の色調を変更する場合には例えば RasMol>color trace blue ▽, color backbone red ▽, color wireframe yellow ▽のように入力します。同様にリボン表示の色調変更は RasMol>color ribbon magenta のように入力します。後で述べますが任意の領域を限定して、線の太さ、色調を変更することもできます。

#### ⑧構造モデル上のアミノ酸残基番号の特定:

構造モデルを眺めていて、この部分はアミノ酸配列上のどの残基に対応するのかを調べたい場合、L面 RasMol>set picking label ▽と入力した後、G面に戻り構造モデルの任意の部分をマウスポインターでクリックするとアミノ酸名と番号が表示されます。同じ場所を再度クリックすると番号が消えます。L面 RasMol>label off ▽と入力しても文字を消去できます。但し v2.6 beta ではペプチド鎖が Ribbon,

Strand, Cartoon, Trace 表示されている場合、この番号表示は機能しません。通常、アミノ酸は3文字表記、CA ( $\alpha$ 炭素)、CB ( $\beta$ 炭素)、N (窒素)等の付属表示があり番号はPDB座標データファイル中の指示に従います。例えば tPA プロテアーゼドメインのPDBデータファイル中の番号付けはキモトリプシン番号付けになっておりますから、tPAの本来の1~527アミノ酸残基番号には対応していません。従って番号を対比したい場合には1)~②で説明したデータファイル詳細を眺める必要があります。文字フォントサイズを変更する場合は例えばL面 RasMol>set fontsize 16 ▽のように入力すると大きくなります。フォント幅およびフォントの間隔の調整は v2.6 beta 2 a では不可ですが、v2.7.1 では可能です。RasMol>set fontstroke 1 ▽と入力すると幅が変更でき、RasMol>set fontsize 16 PS ▽と入力しますと proportional spacing になりやや体裁が良くなります。また文字色を変更することも可能で RasMol>color label black ▽とすれば黒色になります。他色を選ぶ場合も同様です。ある程度きれいに画像を印刷したい場合、PS や fontstroke は重要な機能となります。

#### ⑨ジスルフィド結合の表示:

L面 RasMol>ssbonds ▽と入力すれば、L面にはボンド数が表示され、G面には通常、硫黄原子間の結合のみが表示されます。これを $\alpha$ 炭素間を結ぶ表示に変更するには RasMol>set ssbonds backbone ▽, 結合の太さを変更するには RasMol>ssbonds 100 ▽。同様に色を変えるには RasMol>color ssbonds red ▽のように入力します。

#### ⑩ペプチド鎖の任意の領域を選択し表示法を変更する:

アミノ酸あるいは原子単位で選択可能です。例えば trace 表示されているペプチド鎖のうちアミノ酸残基の1, 2, 5, 25を wireframe 表示したい場合 RasMol>select 1, 2, 5, 25 ▽ RasMol>trace off ▽ RasMol>wireframe ▽のよう

に入力します。Select コマンドに続く数字は PDB データファイル中のアミノ酸番号として認識されます。線の太さを調整するには RasMol>trace 100▽と入力すると wireframe の部分のみ太さ変更されます。このあと続けて G 面タスクバー **Display** プルダウンメニュー Ball&Sticks を選択すると wireframe 部分のみ表示変更されます。さらに Ball&Sticks 表示に dot surface 表示を重ねあわせるには RasMol>dots 50 のように入力します。アミノ酸残基 1~50 を連続して選択する場合には RasMol>select 1-50▽と入力するだけで十分です。個々の原子を選択する場合は RasMol>select atomno=1, atomno=3, atomno=10▽ のように入力します。原子の通し番号は PDB データファイルに記載されていますのでこれを参照します。ただし、連続番号の付いた原子群を選択する場合、アミノ酸残基を選択する要領とは異なり RasMol>select 1-50▽のようなコマンドは実行できません。必ず atomno=1, atomno=2, atomno=3, のような入力が必要で、RasMol のコマンド入力のうちでもっとも手間のかかるコマンドです。アミノ酸残基を選択した場合、ペプチド結合に参与している原子群も表示されるため、trace 表示と組み合わせる場合やや見にくくなります。側鎖のみを表示したい場合には上記のように原子単位の選択が必要になります。Select コマンドを使う場合、続けて変更希望するコマンドを入力することが必要です。Select のみでは L 面に xxx atoms selected という表示が出るのみで G 面グラフィックスには何の変化も表われません。Select コマンドに続いて次のコマンドを入力した場合、それが実行される領域は直前の select コマンドで指定した領域に限定されます。元に戻り全ての領域を選択するには RasMol>select all▽と入力します。

#### ⑪アミノ酸表記の微調整および画像印刷:

tPA フィンガードメイン 1 TPM を例にとりペプチド鎖のアミノ末端(セリン)、カルボキシ

ル末端(セリン)にラベルを付ける場合は以下のようにします。RasMol>select atomno=1▽ RasMol>label S 1▽ RasMol>select atomno=812▽ RasMol>label S 50▽。3文字アミノ酸表記するには RasMol>label Ser 50▽のように入力します。⑧のようにフォントサイズ、幅を調整すれば体裁をコントロールできます。表記する場所は決して本来の位置にこだわる必要はありませんから、上記 RasMol>set picking label ▽で分子中の表記したい場所をクリックするとアミノ酸番号表示で出ますので、座標データファイルを参照して対応する原子の通し番号を RasMol>select atomno=xxx ▽で選択し、RasMol>label S 50 ▽のように入力すれば G 面の構造モデルの任意の位置に表記することができます。自明のことではありますが、原子が存在しない場所に表記することはできませんので、この場合には別途描画ソフトウェアを利用しなければなりません。

画像印刷方法を説明いたします。G 面に表示されている画像を印刷するには v.2.6 beta の場合はタスクバーメニュー **File** → Print で実行可能ですが粗い印刷になり、publication 目的には耐えられないと考えられます。理由はわかりませんが v.2.7 ではこの print が機能しません。いずれにせよ RasMol の有する機能では精度の高い印刷は困難ですから、次のような対処が必要になります。本シリーズ論文 tPA で著者が作製したステレオ表示画像を印刷した場合を例にとって説明します。G 面に希望とする最終構造モデルを表示します。タスクバーメニュー **Options** → stereo を選択します。G 面上にステレオ図が表示されます。慣れたヒトであればこの画像を眺めればステレオ構造を見ることができます。そして RasMol 画面をディスプレイいっぱい拡大し、構造モデルも画面内で欠失しない程度まで拡大します。ディスプレイは出来る限り高解像度、インチ数の大きいものがベターだそうです。この構造画像モデルを保存するためにタスクバーメニュー **Export** → BMP

を選択します。ファイルの拡張子は xxxxxx.bmp とします。Bmp ファイルは Windows に付属しているアクセサリソフトウェア・ペイントで読み込み・処理可能です。RasMol マニュアルには.gif ファイルとし保存し市販の Lview Pro ソフトウェアで処理する方法が記載してありますが、筆者が試行した限りではペイントと大差はないようでした。印刷はカラープリンタ EPSON PM-C 750 を使用し、45~50%に縮小、A4 厚手のフォトプリント紙、印刷方向 A4 横、プリンタの最高解像度を選択しました。ステレオ図では最終仕上がりで左右の図の間隔が 4.5 cm~6 cm 程度必要で（この間隔は紙面から眼までの距離を約 60 cm とした時の設定です）、この程度の縮小でほぼこの間隔に収まりますが、各自調整が必要です。最終チェックとして印刷後の画像の観察を行う必要があります。ステレオ図を眺めるとペプチド鎖が奥行きをもって表示されますが、ペプチド鎖が重なっている部分では印刷の紙上のペプチド鎖の前・後ろの表示と立体を眺めた時のペプチド鎖の前・後ろ位置が異なり、エッシャーの絵のような位相のズレが発生する場合があります。立体視した時の位置関係が正しいわけですから印刷画面をマニュアルで修正する必要があります。RasMol のグラフィックスは transparent が基本となっておりますのでペプチド鎖の重なり部分におけるこの印刷上の問題は避けられないと思いますが、画像を表示・保存する時、ペプチド鎖の色を濃い色調、例えば黒、青にしておくこの問題が若干解消できます。

#### 4. おわりに

現在本会誌に連載中の「立体構造で見る凝固線溶蛋白質の作用機構」tPA に関する小論に掲載した図はすべてこの RasMol を使用して作製したものであります。RasMol は非常に優れたソフトウェアであることを確信し、その過程において得られた経験をここにまとめた次第です。これまでに説明した操作方法により Ras-

Mol をほぼ自在に使うことができるのではないかと思いますし、この外 RasMol には例えばある任意の原子間の距離を表示する、あるいはある特定のアミノ酸残基の周辺何オングストローム以内にある残基を表示する、のような多くの優れた機能がありますので、今後マニュアルを参照して理解を深めて頂くことを期待しております。当世風ゲノム研究の当然の帰結として多くの新しい蛋白質が生まれてきており、これらの蛋白質の立体構造をかたっぱしから high-throughput 手法で決定しようという動きもあるようです (Nature, **400**: 494, 1999, Science **285**: 1342-1346, 1999)。従来、構造とはやや縁の遠かった研究者にとっても近い将来ある程度構造を理解することは必然の流れとなりつつあるようであり、RasMol はその手助けになるのではないかと考えております。RasMol は 1995 年に公開されて以来多くの研究者の支援によりここまで発展してきましたが、さらに University of Massachusetts の Eric Marz は Protein Explorer として非専門の方々にもより使いやすい形で開発を進めているようですので興味のある方はウェブサイトをご覧ください ([www.umass.edu/microbio/chime/explorer/](http://www.umass.edu/microbio/chime/explorer/))。

#### 文 献

- 1) Sayle RA, Milner-White, EJ: RASMOL: biomolecular graphics for all. Trends Biochem. Sci. **20**: 374-376, 1995
- 2) Laskowski RA, Hutchinson EG, Michie AD, Wallace AC, Jones ML, Thornton JM: PDBsum: a Web-based database of summaries and analyses of all PDB structures. Trends Biochem. Sci. **22**, 488-490, 1997
- 3) 平山令明: 生命科学のための結晶解析入門, 東京, 丸善株式会社, 1996 年
- 4) 中村春木, 有坂文雄, 編集: タンパク質のかたちと物性, 東京, 共立出版株式会社, 1997 年
- 5) Branden C, Tooze J: Introduction to Protein Structure 2nd ed, New York, Garland Publishing, 1999
- 6) 本間義夫, 川端 潤: パソコンで見る動く分子事典, ブルーバックス, 東京, 講談社, 1999 年