

初めて SPM シミュレータを使われる方に向けての

ソルバ毎 SPM シミュレータ計算事例

「SPM シミュレータ用途別機能紹介資料[Part3:バイオ関連試料の観察]」編

株式会社 Advanced Algorithm & Systems

2018.1.4

# 1・目次

[Part3: 液中環境下での高分子観察]が提示する**計算事例（1～8）**は、用途別市場において

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ApplicationField.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM\\_simulator\\_application\\_examples.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_simulator_application_examples.html)

研究テーマでは、バイオ・ソフトマテリアル

用途別市場では、食品 製薬 化粧品 バイオ 合成ゴム 医療用品

に固有の科学的知見、或は支配的条件に従う、代表的シミュレーション（アルゴリズム）に原理的に準拠しており、この用途別市場の産官学SPMユーザーには、共通に使用される特性をもち、ユーザ所属先の事業形態・から部分を担当するか否か、の差異があるのみである。

還元すれば、これら計算事例は、用途別市場の産官学SPMユーザーに取り、原理的に共有され、ユーザ各位が共通に使用出来ることになる。

共通性に着目し、初めてSPMシミュレータを使われる方に向けての、ソルバ毎SPMシミュレータ計算事例として用意しました。計算結果の解説も記載しています。SPMシミュレータを使う時の、基本的なシミュレーション実行例を示しています。実行例のデータファイルをダウンロードして、シミュレーションを行うための工程を知っていただき、その後、必要な箇所だけパラメータを変更すれば、ご要望に合ったシミュレーション計算を実行することができます。**本編は「バイオ関連試料の観察」向けです。**

以下に参考事例モデルの各ソルバによる計算例のリストを示します。

## 1・目次（本ページ）

## 2・GeoAFMによる Rhodopsin の AFM 像

- ・ (a) Cytoplasmic surface (**計算事例 1**)

類例：不活性状態と活性状態のロドプシン

不活性状態「PDB：1F88、非対称単位」 モデルデータ・Cytoplasmic (**計算事例 2**)、Extracellular (**計算事例 3**)

活性状態「PDB：3PX0、生物学的単位」モデルデータ・Cytoplasmic (**計算事例 4**)、Extracellular (**計算事例 5**)

- ・ (b) Extracellular surface (**計算事例 6**)

## 3・GeoAFMによるコネクソンの観察

- ・ 整列したコネクソンの AFM 像 (**計算事例 7**)

類例：生物学的単位でのコネクソンの GeoAFM による AFM 像シミュレーション (**計算事例 8**)

## 6・本編でのSPMシミュレータにおけるソルバー一覧

## 2. GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ) CalcImage (RhodopsinのAFM像)

### ●GeoAFM RhodopsinのCytoplasmic surface 計算事例①

計算モード識別番号：[GeoAFM\_CalcImage\_Polymer\_013] (a)

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM\\_CalcImage.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM_CalcImage.php)

分類：GeoAFM (探針・試料から AFM 像計算)、 $\mu\text{m}$ オーダー、高分子、バイオ

事例紹介ページを下に示します。

**【GeoAFM】 Rhodopsin のAFM 像** GeoAFM

ロドプシンは眼の網膜に存在し、光を認識するためのタンパク質である。ロドプシンはディスク膜中に大量に埋め込まれており、AFMによる観察が行われている。ロドプシンはダイマーの列を形成する。ロドプシン・ダイマー列が形成する準結晶を想定し、ロドプシン・ダイマー12ユニット(水素原子を除いて65904原子)から成るモデルを用意した。

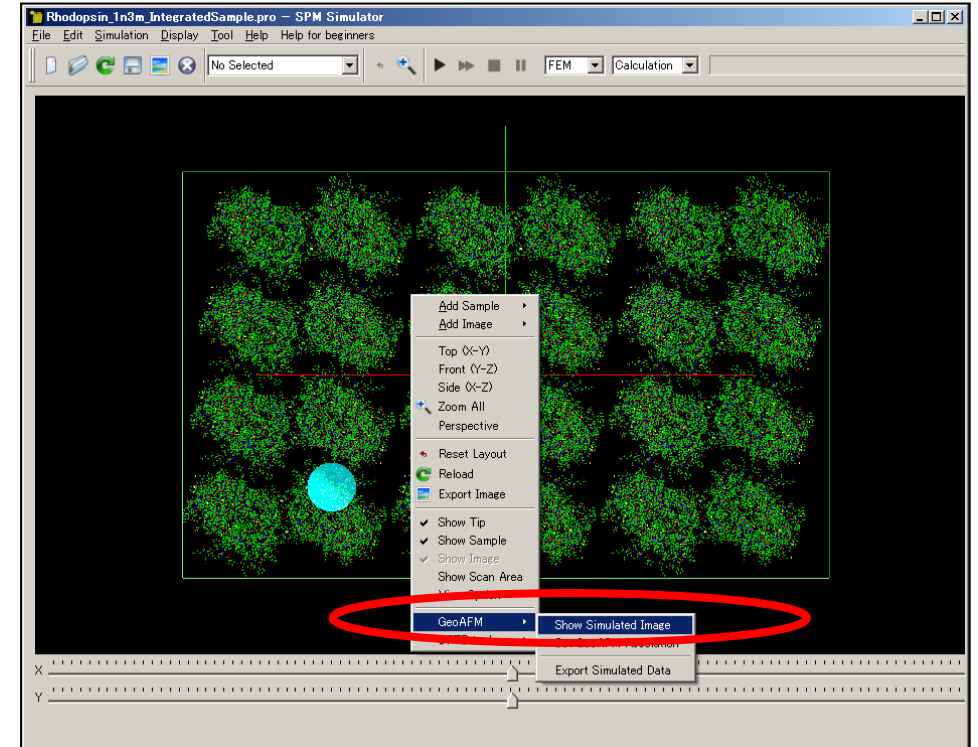
**Simulation** Bird view of the sample.  
12 rhodopsin dimers were constructed based on the PDB 1N3M.  
Rhodopsin dimer They form rows

**Experiment**  
Topography of an open, spread-flattened disk adsorbed to mica and imaged in buffer solution.  
Y. Liang et al., J.Biol.Chem. 278 (2003) 21655-21662.

GeoAFM result is imported to Analyzer.

Cytoplasmic surface Extracellular surface

事例紹介ページ



事例データ読み込み直後TOP画面でのGeoAFMの起動操作

[Show Simulated Image]を選択する。

探針と試料の形状位置関係のみで計算されます。

スキャンエリアの設定は無効です (wまたはdが0の場合は無効となります)。

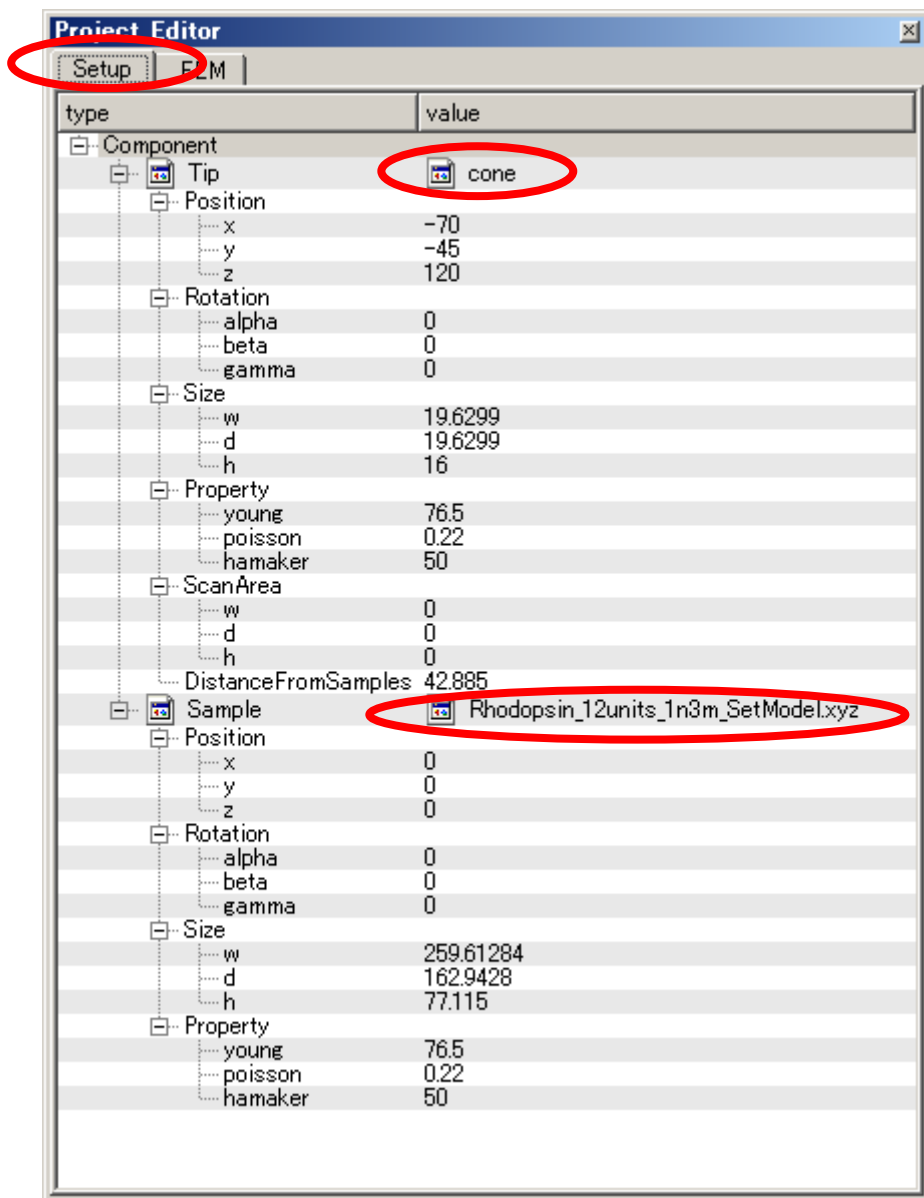
周期境界は考慮されません。GeoAFMは、他ソルバ選択中でも、マウス右クリックによるサブメニュー選択で起動できます(上右図)。

本事例では、眼の網膜にある光受容に特化した、視物質と呼ばれるタンパク質、ロドプシンのAFM像をシミュレートします。

本事例は、**Cytoplasmic surface**の場合です。桿体視物質にある円盤膜(disk membrane)に含まれるロドプシンの、外側を向いている構造表面のAFM像をシミュレートします。

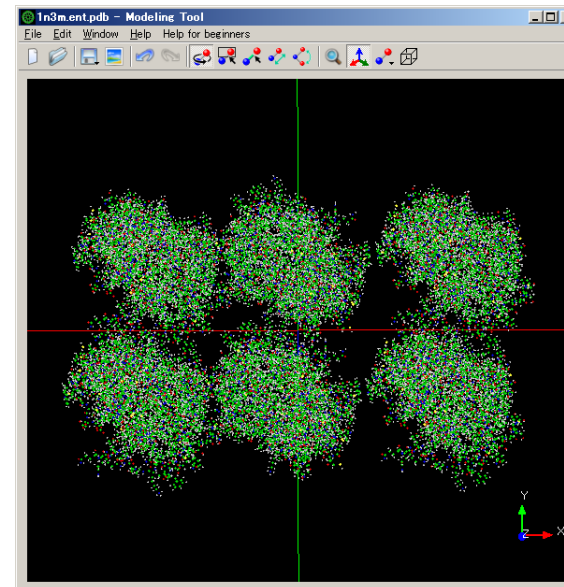
本事例の試料データ「Rhodopsin\_12units\_1n3m\_SetModel.xyz」は、モデリングツール(SetModel)により、「PDB:1N3M、非対称単位」モデルデータを位置

を移動させながら4セット配置したモデルとなっています。「PDB:1N3M」のオリジナルモデルを変更したため、「Cartoon」での表示は出来ません。モデリングツールを用いず、「Add Sample」を利用すると、「Cartoon」での表示も可能です。モデリングツールと同様、位置を移動させながら4セット配置しすることになります。探針は登録済みデータ「cone」(先端:半径1.0Å、角度30.0度)を用います。resolution = 10Åとしました。以下に、紹介事例のセットアップ条件(下左図)と試料モデル「PDB:1N3M」「非対称単位」の「Ball&Stick」および「Cartoon」表示を示します。

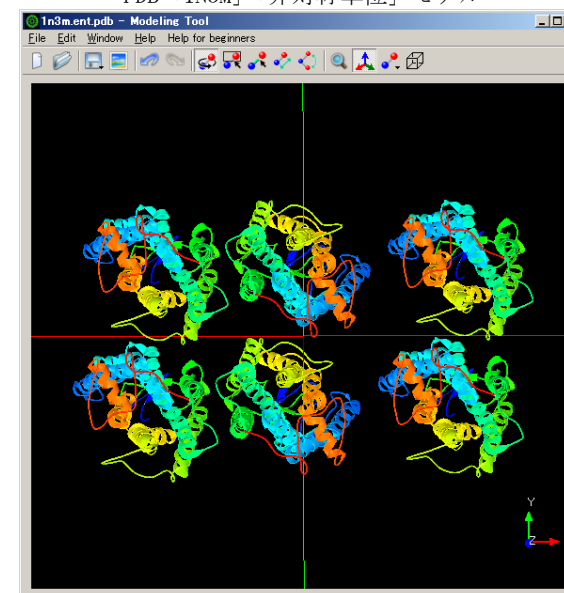


事例紹介モデルのセットアップ条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。



PDB「1N3M」「非対称単位」モデル

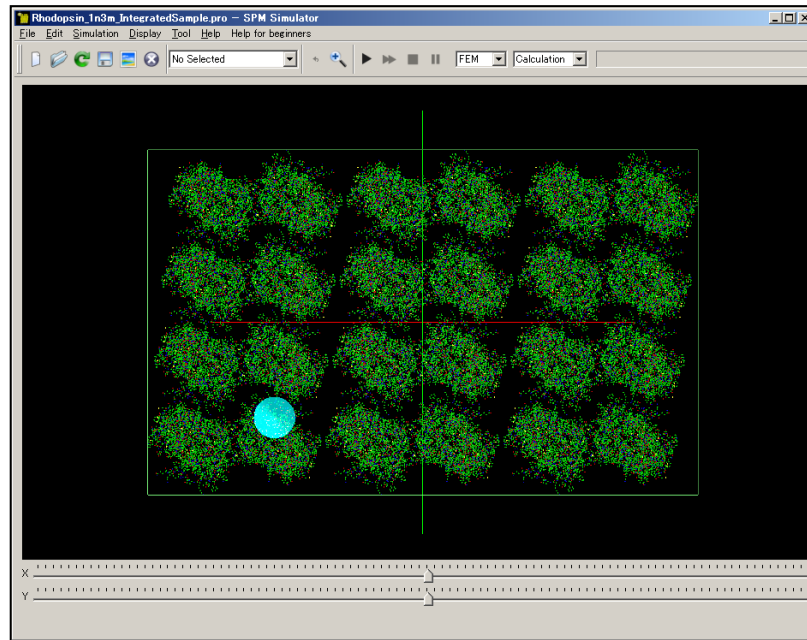


PDB「1N3M」「非対称単位」モデルの

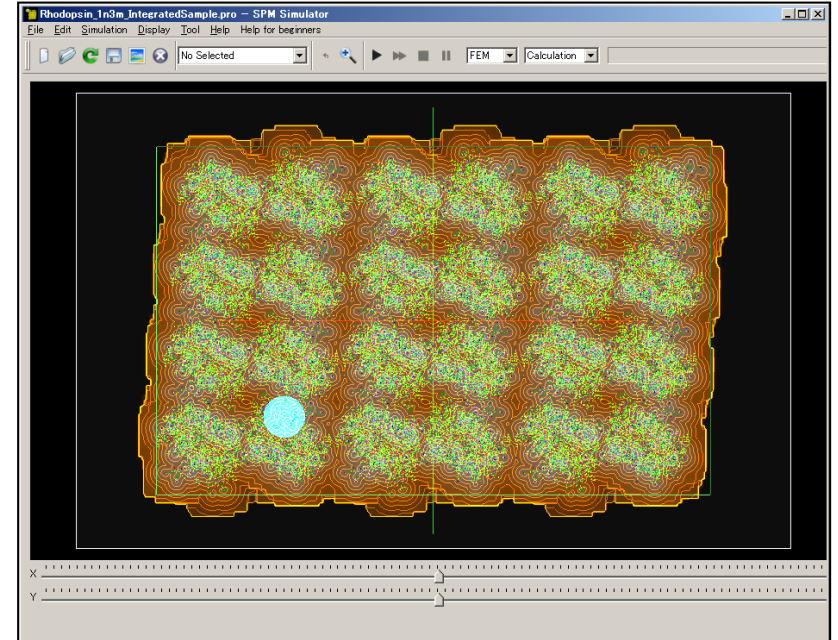
「Cartoon」表示

オリジナル画像とシミュレーション結果の表示を以下に示します。

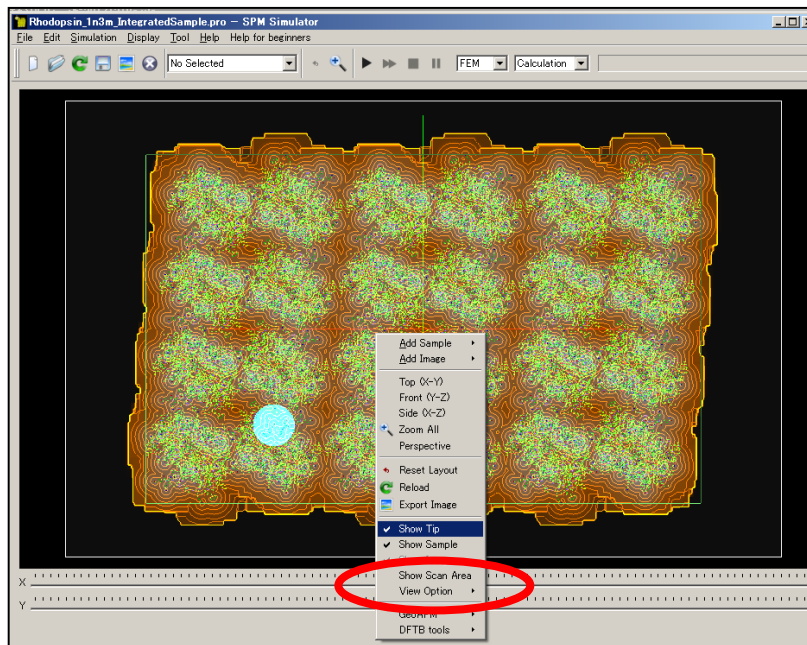
オリジナル画像 TOP



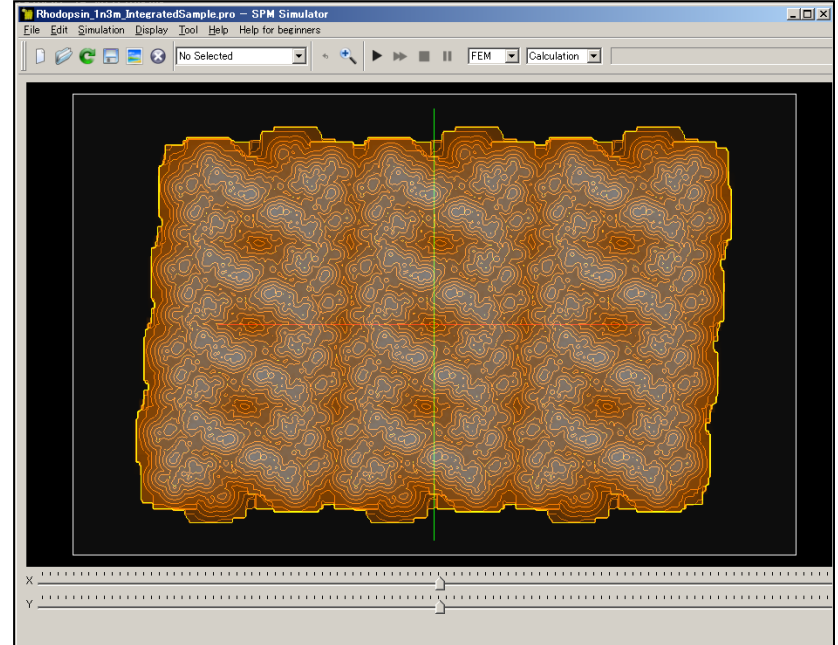
オリジナル画像 TOP シミュレーション結果



探針と試料の表示を停止するサブメニューを選択

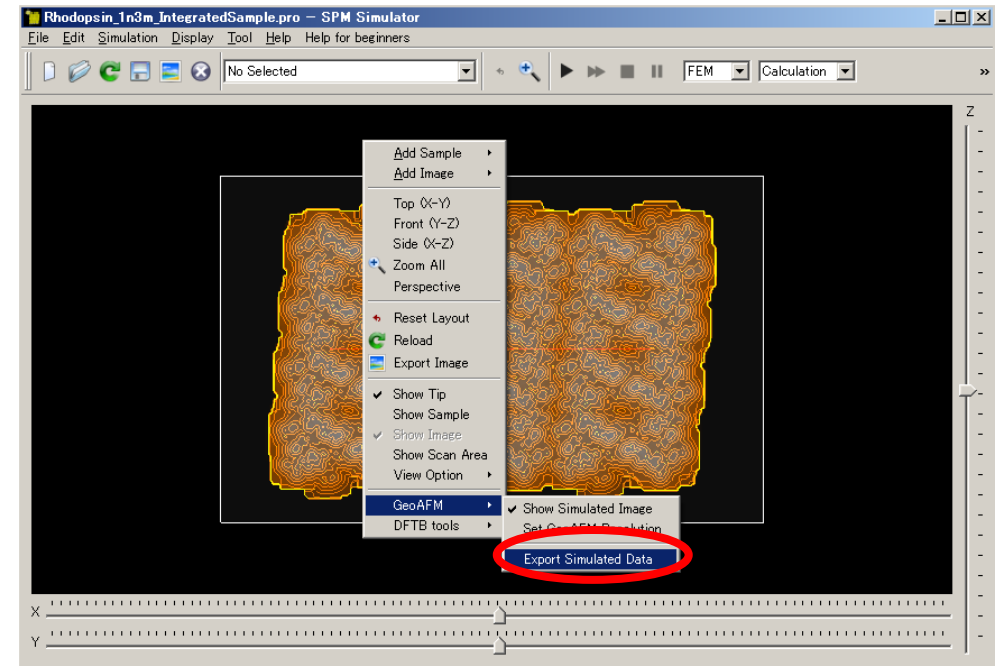


探針と試料の表示を停止したTOPシミュレーション画像

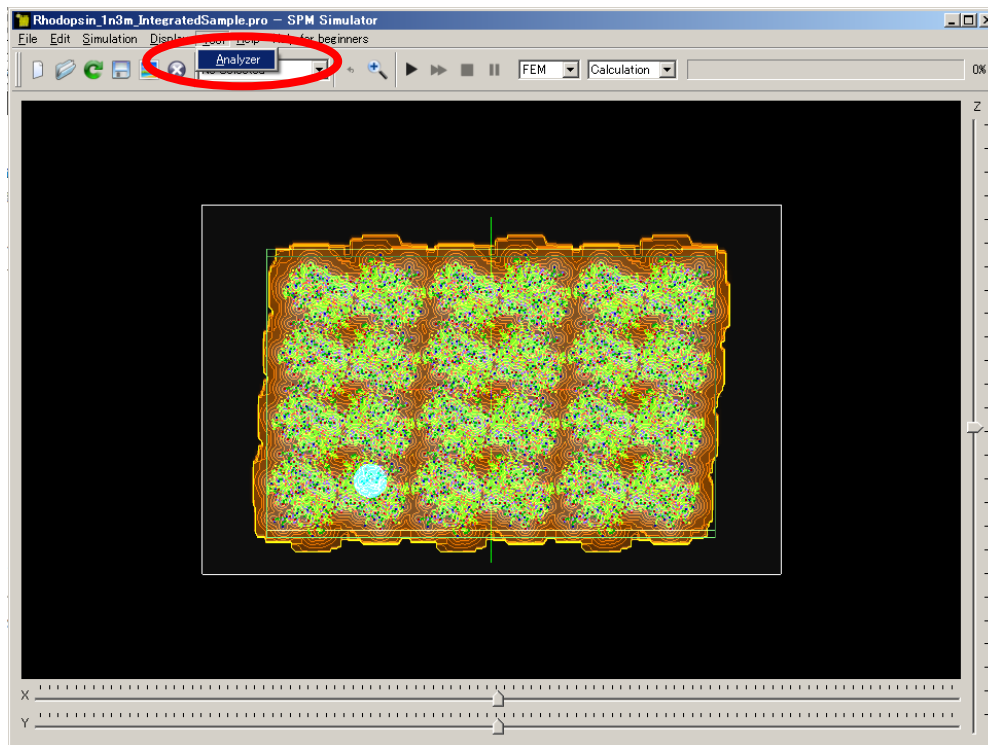


実験データ画像処理プロセッサ「Analyzer」による画像解析のため、GeoAFMは、解析モデルをデータ化し、「cube」ファイルとして保存します。解析結果表示画面で、マウスを右クリックする事により、サブメニューが表示されるので「GeoAFM」→「Export Simulated Data」を選択し、「cube」ファイル名入力後、保存します。メニュー「Tool」→「Analyzer」を選択し、実験データ画像処理プロセッサ「Analyzer」を起動します。「Analyzer」で、上記「cube」ファイルを選択し、画面に表示します。

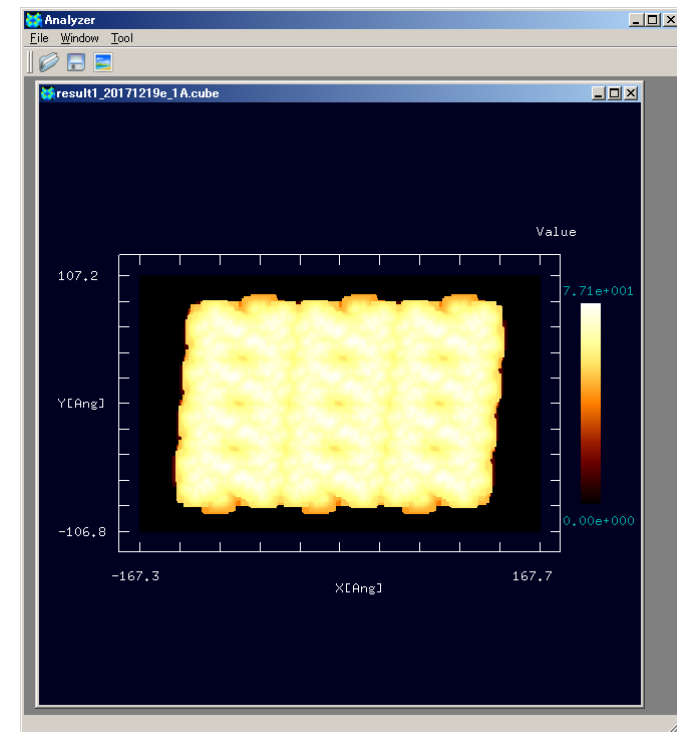
解析結果データの保存



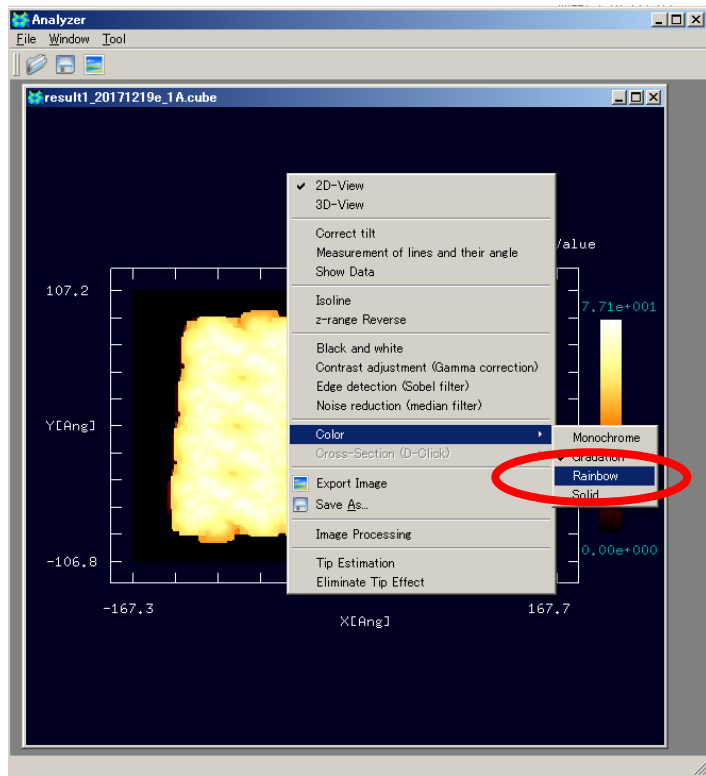
実験データ画像処理プロセッサ「Analyzer」の起動



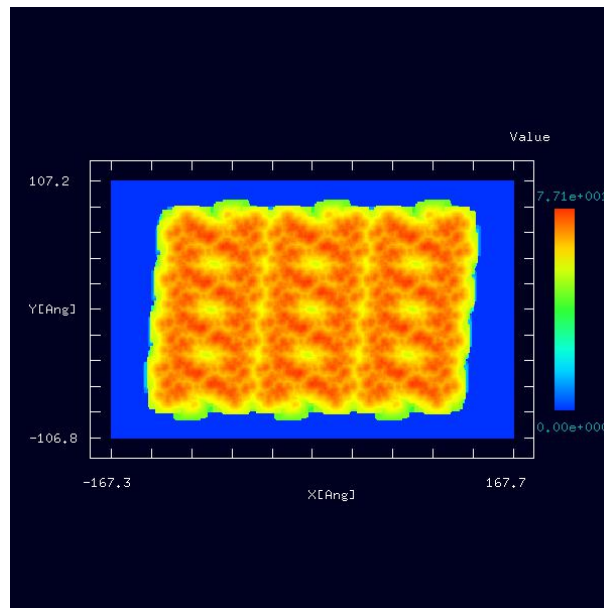
「Analyzer」で、本事例解析データを読みこむ



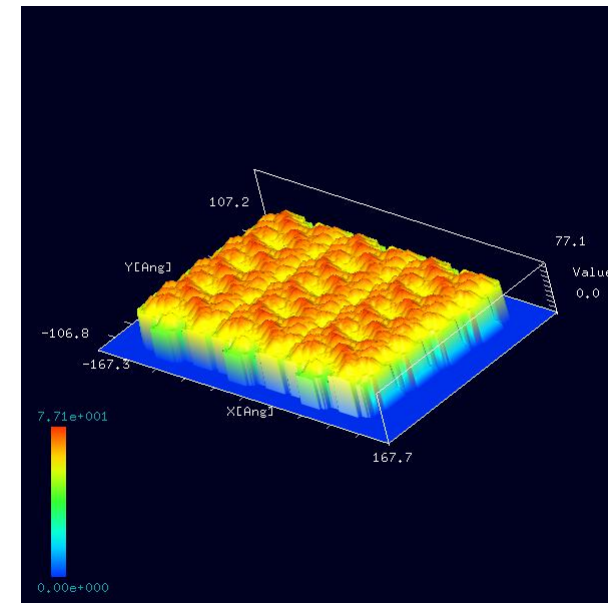
「Analyzer」で[Rainbow]表示を選択する



「Analyzer」で[Rainbow]表示にした図

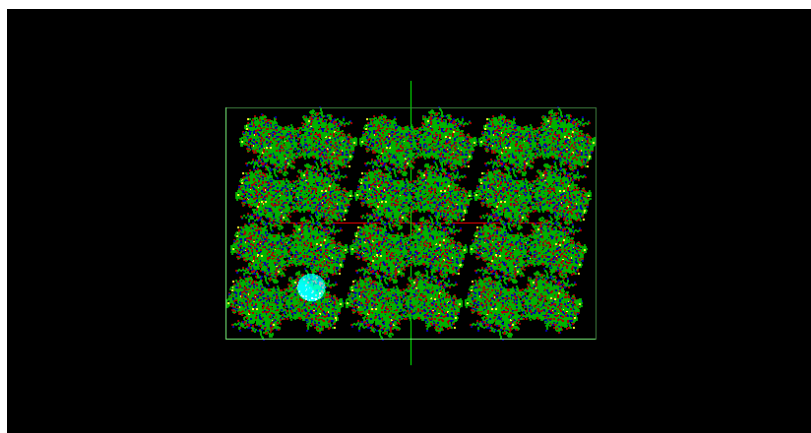


「Analyzer」[Rainbow]表示で3D表示にした図

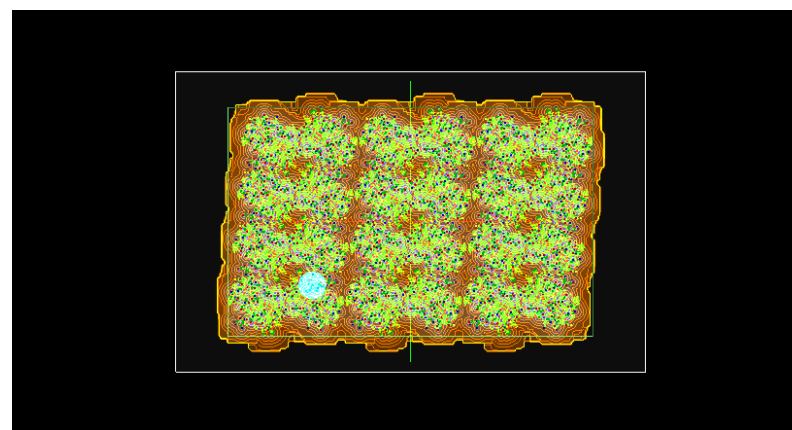


以下にオリジナル画像とシミュレーション結果画像をTOP、FRONT、SIDE、俯瞰として示します。

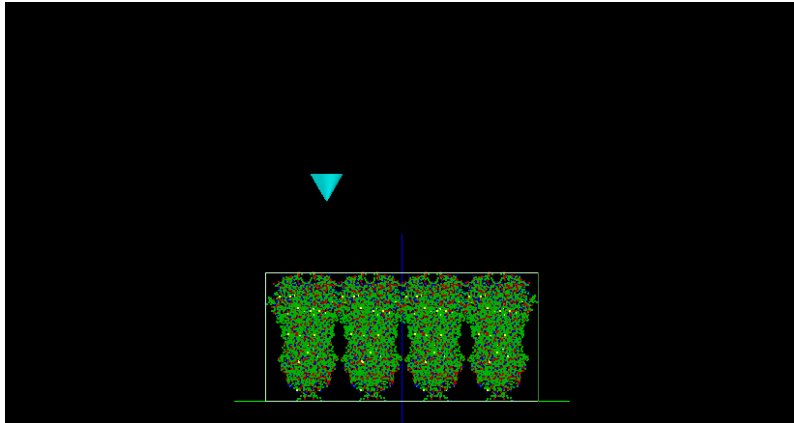
TOP



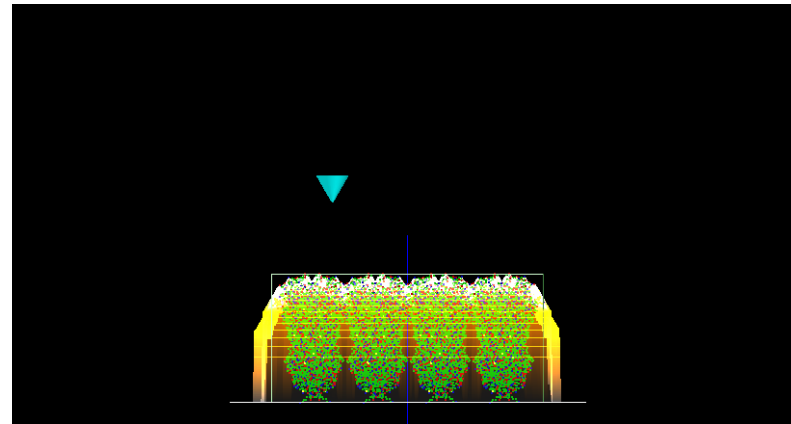
TOPシミュレーション結果



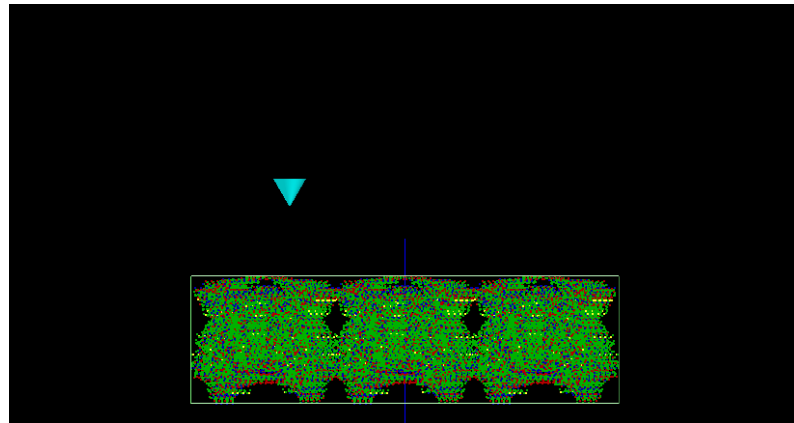
FRONT



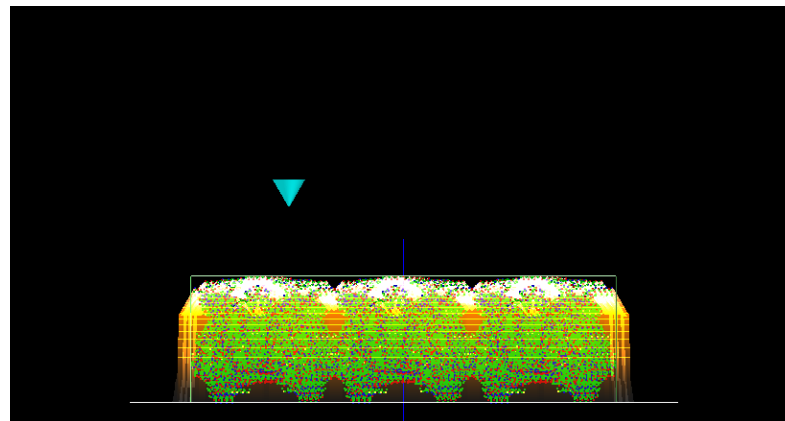
FRONTシミュレーション結果



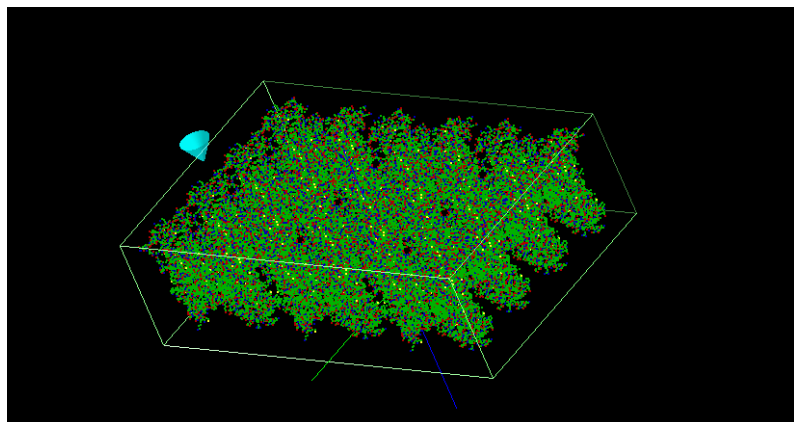
SIDE



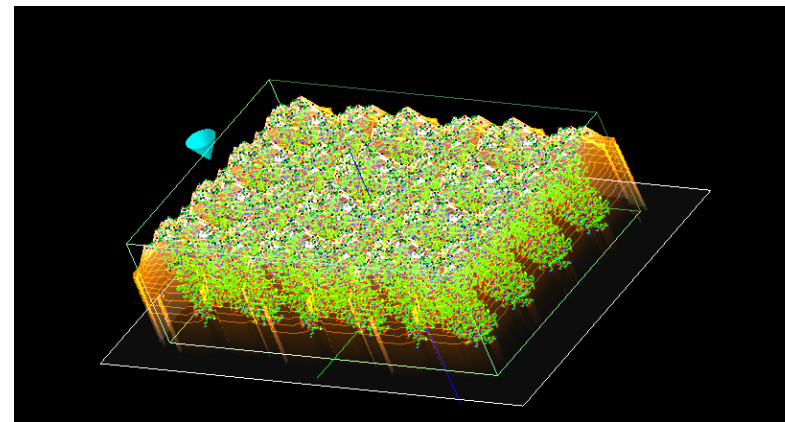
SIDEシミュレーション結果



俯瞰



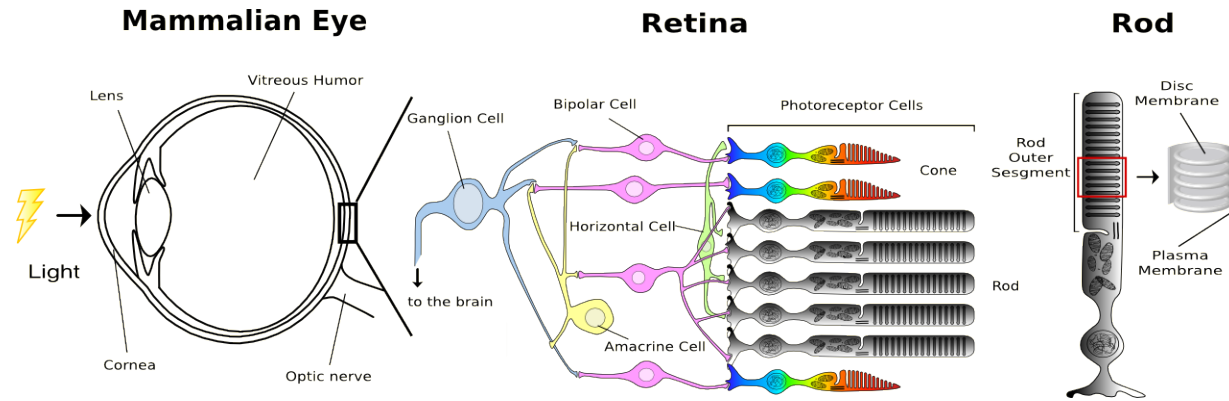
俯瞰シミュレーション結果





## ・ロドプシンとは

眼の網膜には光受容に特化した2種類の視細胞、桿体と錐体が含まれ、それぞれには光を受容するために特別に分化したタンパク質(光受容タンパク質)が含まれる。これらのタンパク質を視物質と呼び、特に桿体の視物質(桿体視物質)をロドプシンと呼ぶ。桿体には外節と呼ばれる光受容に特化した領域があり、その中には円盤膜(disk membrane)と呼ばれるパンケーキ状の膜構造がある。ロドプシンはこの膜構造の中に大量に埋め込まれて存在している。ロドプシンはアポタンパク質と発色団レチナールより構成されており、レチナールが光を吸収することによって異性化しタンパク質部分の構造変化を起こし、Gタンパク質を介して細胞内シグナル伝達系を駆動する。光を吸収するという光受容体としての機能・特性がそのまま分子の物性を反映するプローブとして使えるため、ロドプシンは分光法によってその光反応過程が詳細に解析されており、Gタンパク質共役型受容体(GPCR)のなかでも最も研究が進んでいる受容体としても注目されている。また近年ではロドプシンに近縁なタンパク質(ロドプシン類あるいはオプシン類)が多く同定されており、さまざまな生物種の視覚の他に概日リズムの光同調などの視覚以外の生理機能を担っていることが明らかになっている。(脳科学辞典より)

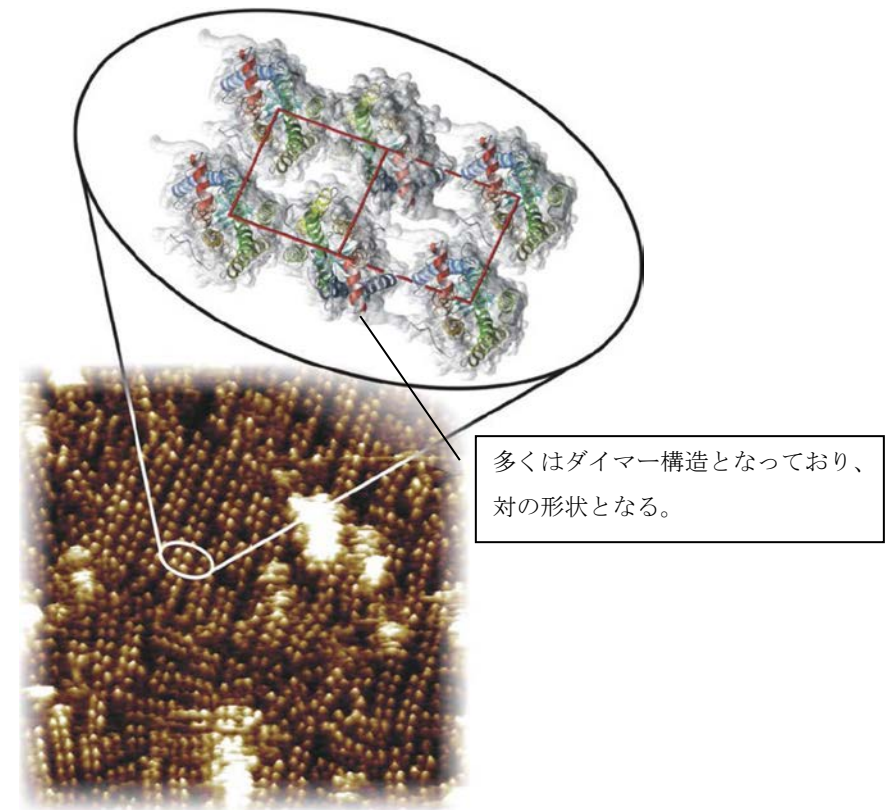
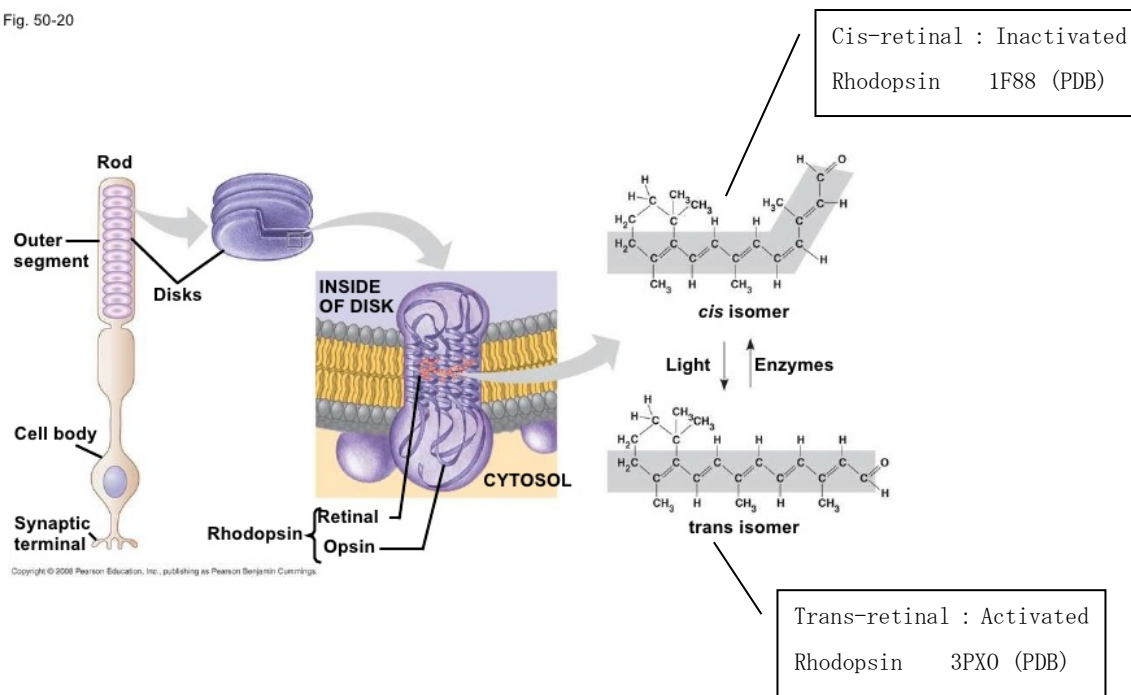


形態的に異なる2種類の視細胞、桿体(Rod)と錐体(Cone)があり、それぞれ、暗所、明所での視覚を分担している。また、錐体には複数のサブタイプがあり、それぞれ、赤、緑、青の光を吸収しやすい視物質が含まれており、色識別を可能にしている。桿体にはロドプシンが大量に含まれる円盤膜がパンケーキ状に重なっている。(脳科学辞典より)

ロドプシンの大きな特徴の一つは光を受容する発色団としてレチナールを含むことである。つまり、ロドプシンはアポタンパク質と発色団レチナールからなる。アポタンパク質のことをオプシン(opsin)と呼ぶ。(脳科学辞典より)

光を受容したロドプシンでは、レチナールが11-シス型から全トランス型に光異性化される。その後、ロドプシンのタンパク質部分の構造変化が起こり、Gタンパク質を活性化する状態に変化する。この過程を「ロドプシンの光反応過程」と呼ぶ。生成した全トランスレチナールは、その後タンパク質部分から遊離し、タンパク質部分は新たに11-シス型のレチナールと結合してロドプシンになる。この過程を「ロドプシンの再生」と呼ぶ。(脳科学辞典より)

Fig. 50-20



ohhs-ap-biology-chapter-50-presentation-74-728

(OHHS AP Biology Chapter 50 Presentationより)

Chemistry and Biology of the Initial Steps in Vision: The Friedenwald Lectureより

Krzysztof Palczewski Investigative Ophthalmology & Visual Science October 2014,

Vol. 55, 6651-6672. doi:10.1167/iovs.14-15502

ロドプシンの多くはダイマー構造となっており、対の形状となります。

注) ダイマー(dimer)または二量体 (にりょうたい) は、2つの同種の分子やサブユニット(単量体)が物理的・化学的な力によってまとまった分子または超分子を言う。二量体を形成することを、おもに化学では二量化、生化学では二量体化という。さらに、3つ・4つのサブユニットがまとまったものは三量体・四量体と言う。(Wikipedia)

### 類例：不活性状態と活性状態のロドプシン

1F88 (PDB) と 3PX0 (PDB) について、以下、円盤膜 (disk membrane) に含まれるロドプシンの、膜内外両側面のAFM像シミュレートを行います。下記2文献より「Cis-retinal」を「1F88 (PDB)」とし、「Trans-retinal」を「3PX0 (PDB)」としました。

1 : Bovine Rhodopsin with Cis-retinal (Inactivated Rhodopsin)

Crystal structure of rhodopsin: A G protein-coupled receptor. Palczewski, K., etc Journal: (2000) Science 289: 739-745 (PubMed) 1F88 (PDB)

2 : Bovine Rhodopsin with Trans-retinal (Activated Rhodopsin)

Crystal structure of metarhodopsin II. Choe, H.W., etc, Journal: (2011) Nature 471: 651-655 (PubMed) 3PX0 (PDB)

・「PDB：1F88、非対称単位」モデルデータを基に、膜内外両側面のロドプシンAFM像をシミュレートした例を参考として示します。計算事例②、③

計算モード識別(番号) プロジェクト名: [GeoAFM\\_CalcImage\\_Polymer\\_1f88\\_Cytoplasmic](#)、[GeoAFM\\_CalcImage\\_Polymer\\_1f88\\_Extracellular](#)

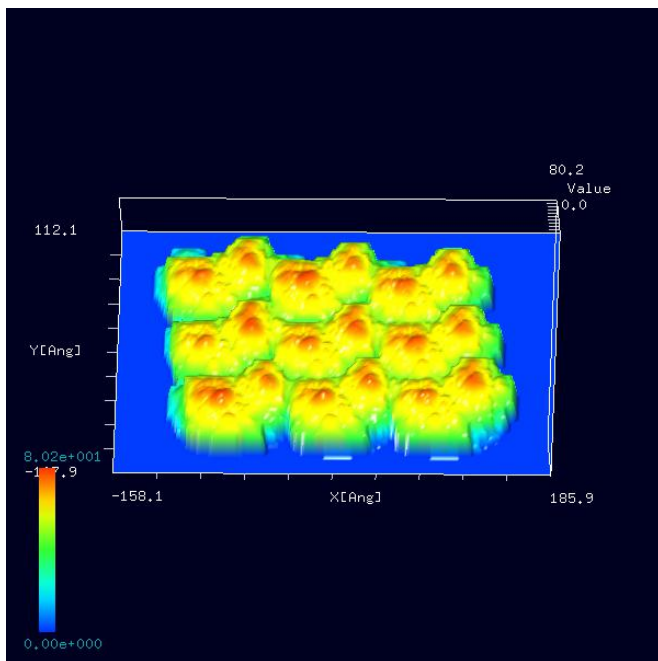
1F88 (PDB) モデルは、ダイマー構造となっており、レチナールが **11-シス型** の場合です。この状態は、**光を受容していない不活性状態** です。本モデルを、ロドプシンAFM実験像を参考に、9モデル(18個体)を3×3となるよう並べました。Cytoplasmic(ディスク外側)面に対して Extracellular(ディスク内側)面は、紹介事例では、モデリングツール(SetModel)により、解析モデルを一つのモデルとして扱っているため、180度の回転で観察できますが、本例では、9モデル(18個体)それぞれに回転と平行移動を行い、妥当な配置を決めています。

GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ)によるAFM像シミュレートの後、解析結果表示画面で、マウスを右クリックする事により、サブメニューが表示されるので「GeoAFM」→「Export Simulated Data」を選択し、「cube」ファイル名を入力後、保存します。

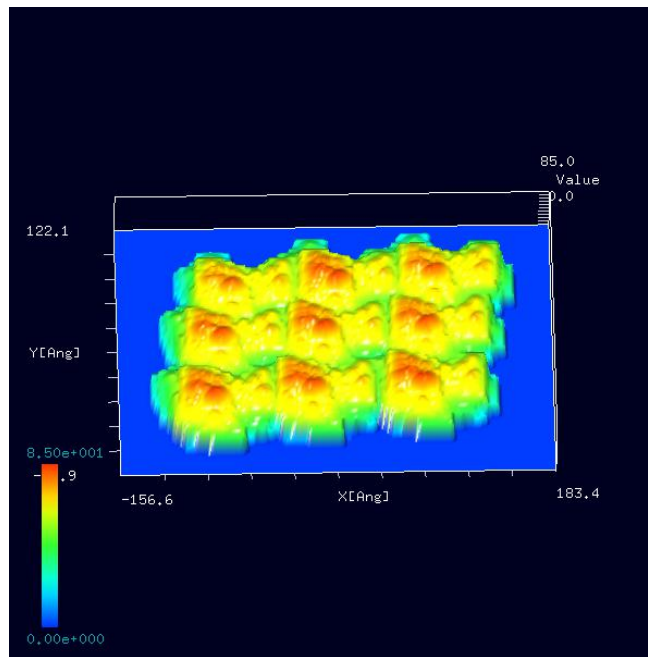
メニュー「Tool」→「Analyzer」を選択し、実験データ画像処理プロセッサ「Analyzer」を起動します。「Analyzer」で、前記「cube」ファイルを選択し、画面に表示します。「3DView」及び「Color」→「Rainbow」を選択し、表示方向を俯瞰しやすい方向に変更します。

以下に、Cytoplasmic面(左図)、Extracellular面(中央図)及び「非対称単位」モデルの「Cartoon」表示(右図)を示します。

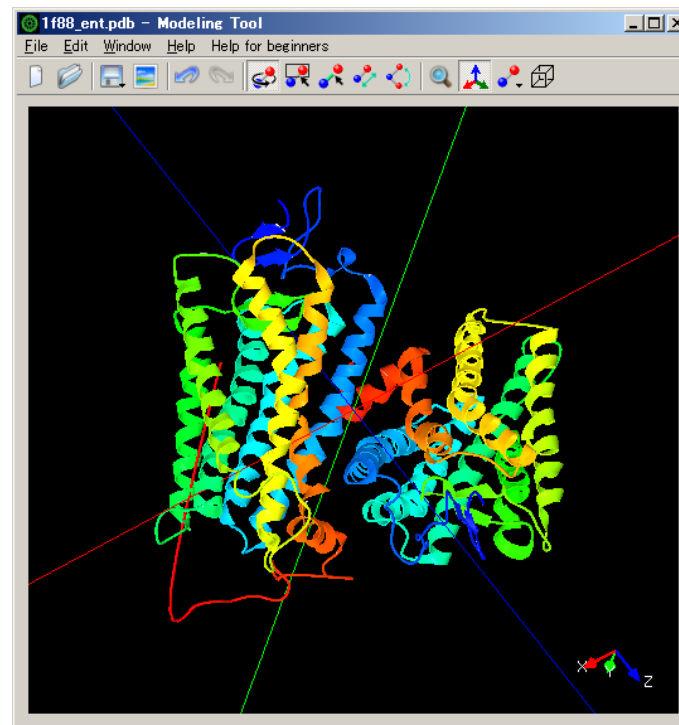
1F88 (PDB) Cytoplasmic



1F88 (PDB) Extracellular



「PDB：1F88、非対称単位」モデル「Cartoon」表示



・「PDB：3PX0、生物学的単位」モデルデータを基に、膜内外両側面のロドプシンAFM像をシミュレートした例を参考として示します。計算事例④、⑤

計算モード識別（番号）プロジェクト名：[GeoAFM\\_CalcImage\\_Polymer\\_3px01\\_Cytoplasmic](#)、[GeoAFM\\_CalcImage\\_Polymer\\_3px01\\_Extracellular](#)

3PX0 (PDB) モデルは、ダイマー構造となっており、レチナルが全トランス型の場合です。この状態は、光を受容した活性状態です。

本モデルを、ロドプシンAFM実験像を参考に、9モデル（18個体）を3×3となるよう並べました。Cytoplasmic（ディスク外側）面に対して Extracellular（ディスク内側）面は、紹介事例では、モデリングツール(SetModel)により、解析モデルを一つのモデルとして扱っているため、180度の回転で観察できますが、本例では、9モデル（18個体）それぞれに回転と平行移動を行い、妥当な配置を決めています。

GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ)によるAFM像シミュレートの後、解析結果表示画面で、マウスを右クリックする事により、サブメニューが表示されるので「GeoAFM」→「Export Simulated Data」を選択し、「cube」ファイル名を入力後、保存します。

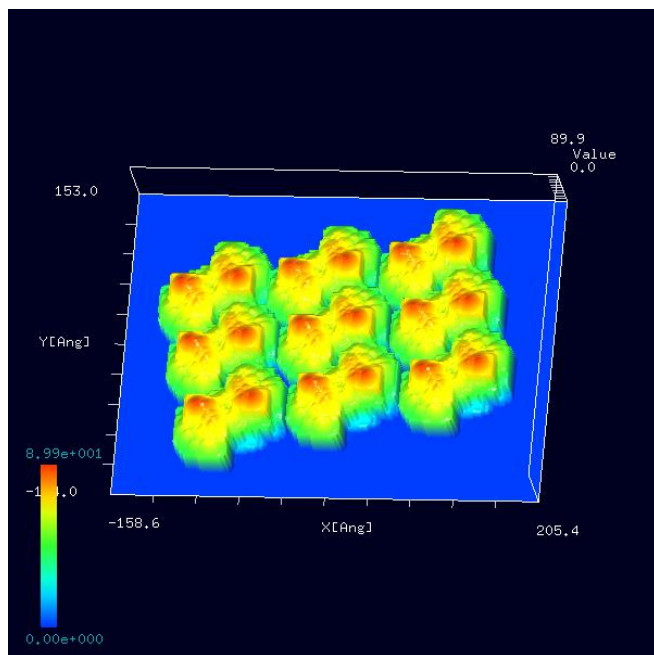
メニュー「Tool」→「Analyzer」を選択し、実験データ画像処理プロセッサ「Analyzer」を起動します。「Analyzer」で、前記「cube」ファイルを選択し、画面に表示します。「3DView」及び「Color」→「Rainbow」を選択し、表示方向を俯瞰しやすい方向に変更します。

以下に、Cytoplasmic面（左図）、Extracellular面（中央図）及び「生物学的単位」モデルの「Cartoon」表示（右図）を示します。

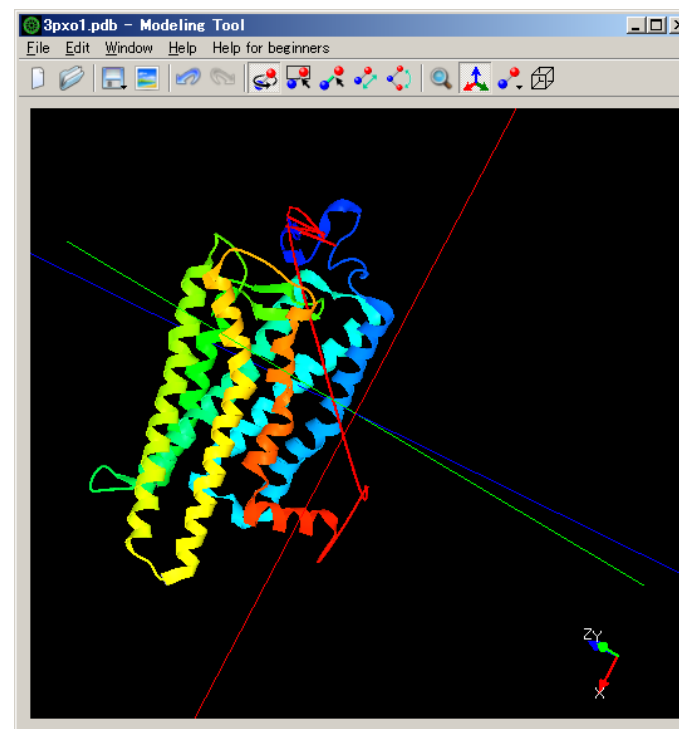
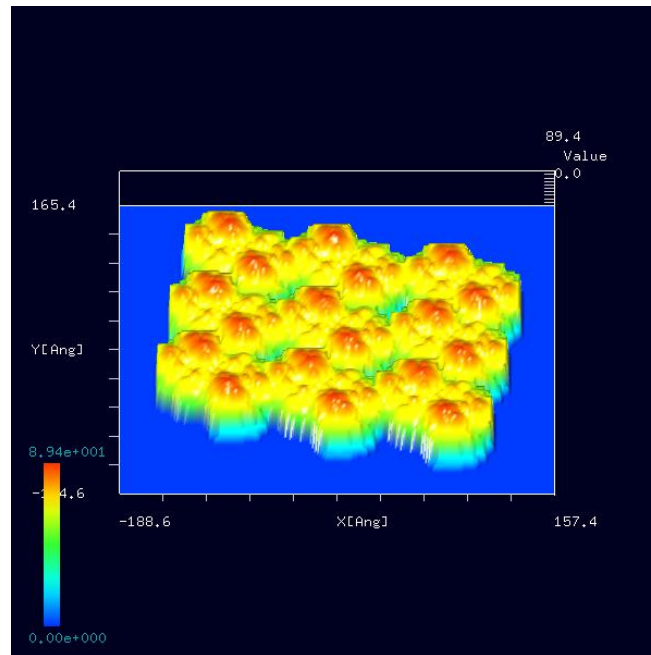
「Cartoon」表示では、ダイマー構造の表示になっていませんが、データはダイマー構造となっています。

「PDB：3PX0、生物学的単位」モデル「Cartoon」表示

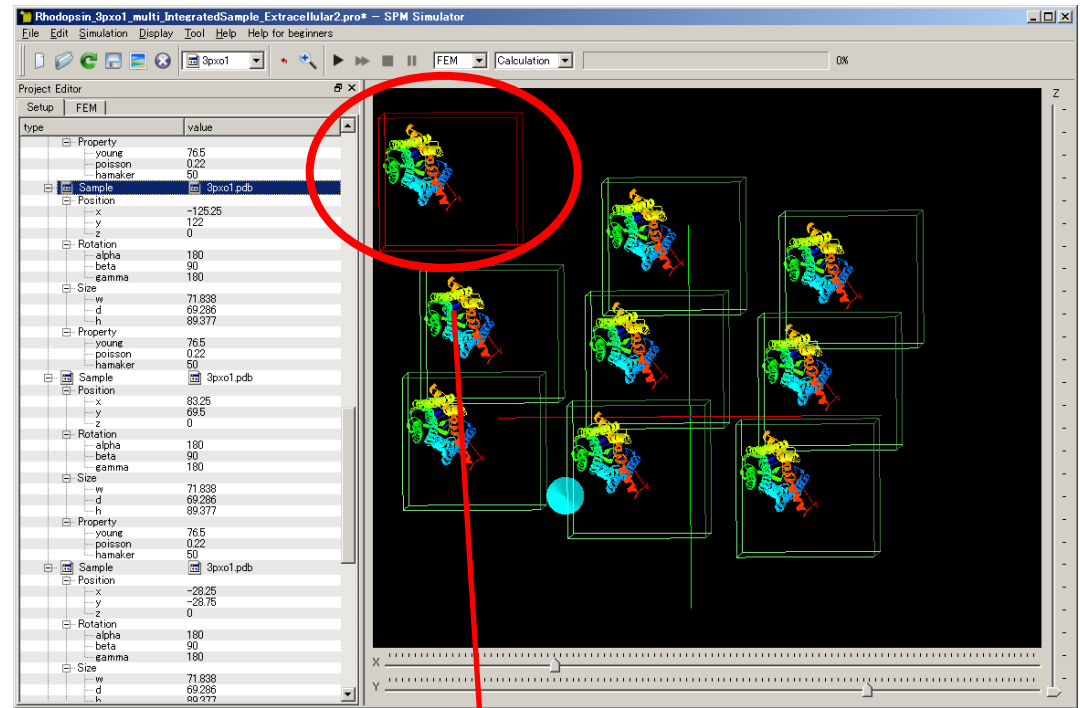
3PX0 (PDB) Cytoplasmic



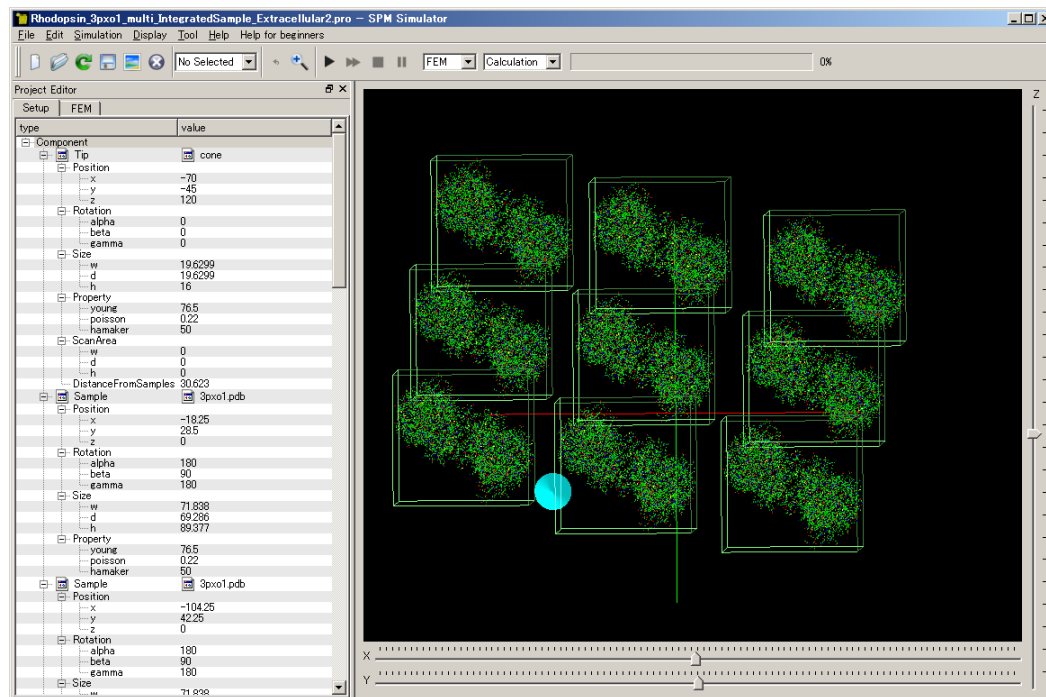
3PX0 (PDB) Extracellular



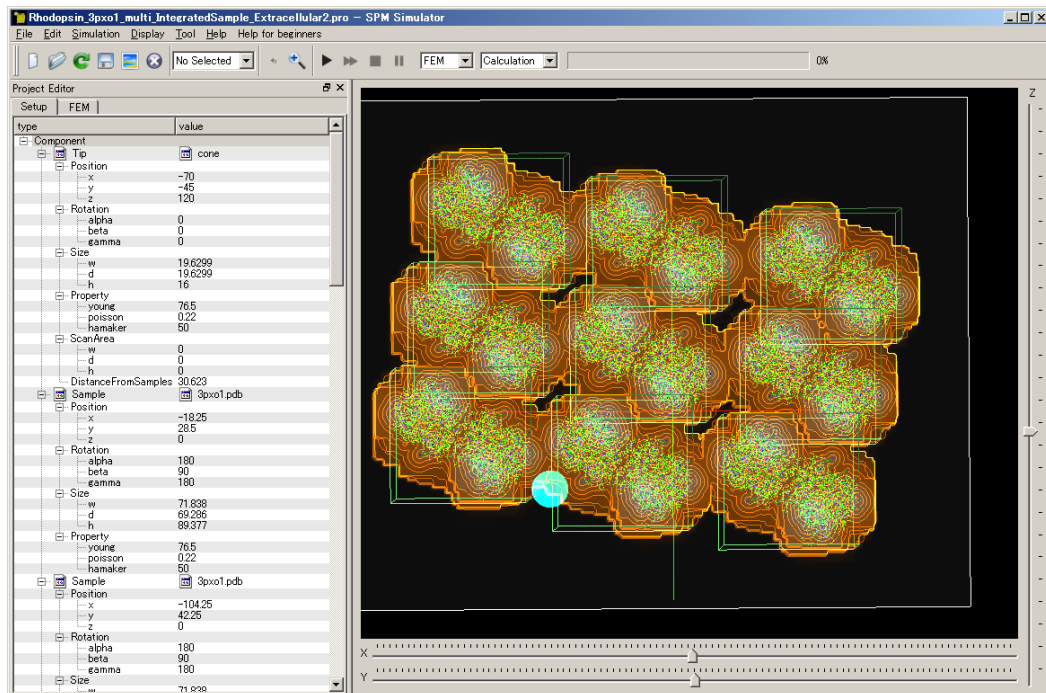
・モデリングツール(SetModel)により解析モデルを作成する以外にSPMシミュレータの「Add Sample」機能を用いる事も出来ます。メニュー「Edit」→「Add Sample」→「File」より単位モデルデータを読み込みます。モデルの初期配置位置は、デフォルト位置となるため、所要の位置に移動する必要があります。移動したい単位モデルをマウスで選択状態(赤枠表示)にし、「シフトキー」+マウスピック移動でサンプルモデルの平行移動が可能です。(右図)



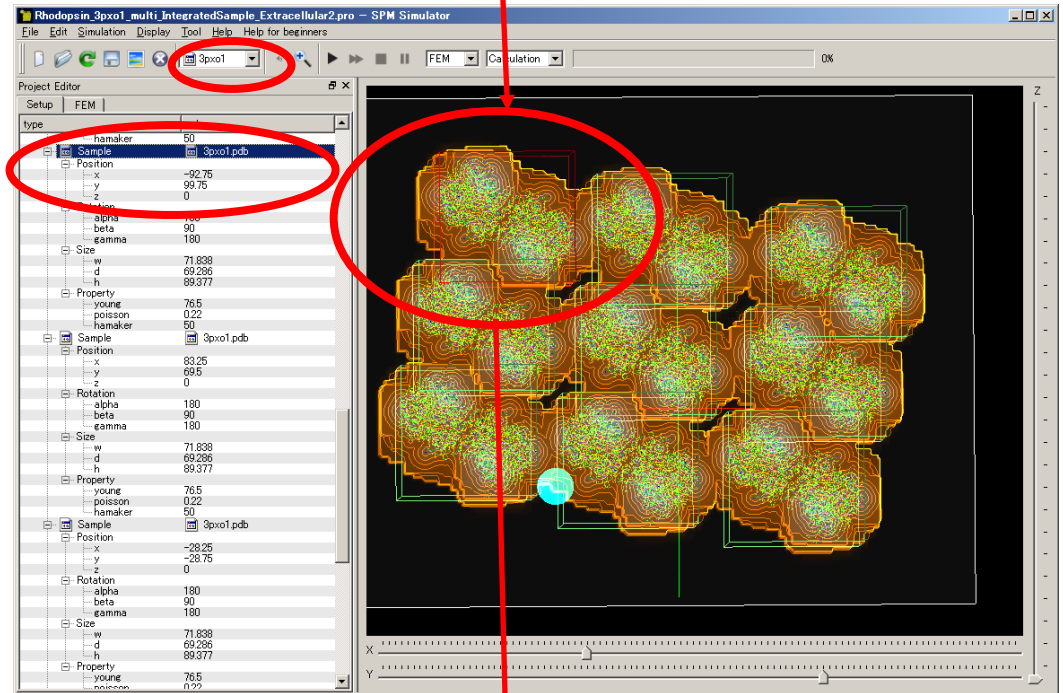
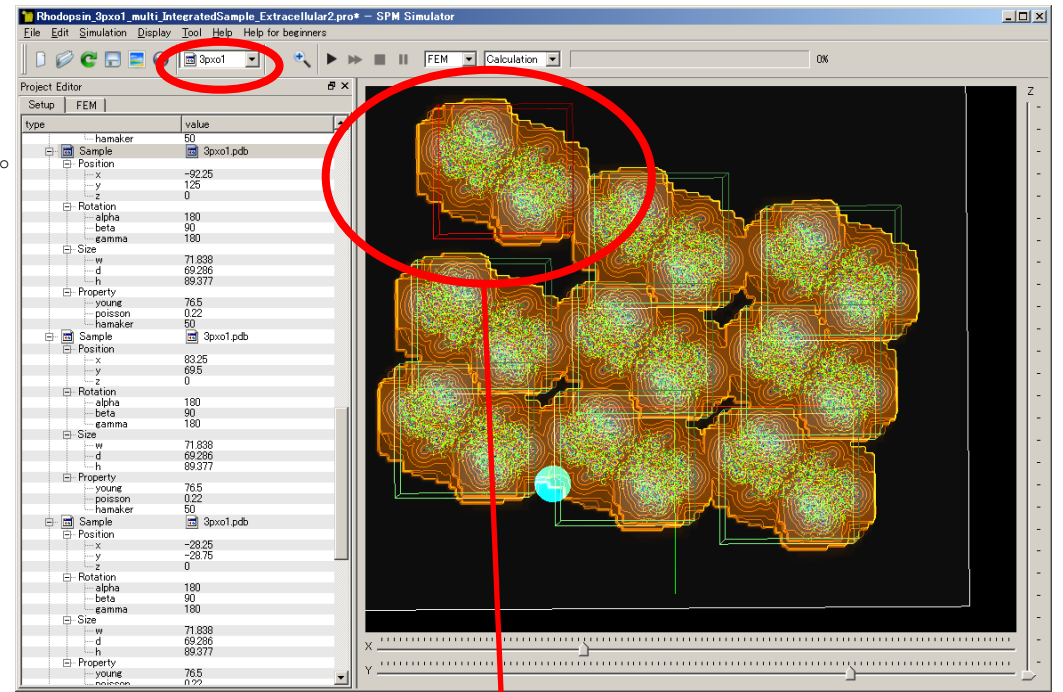
・解析モデルを「Cartoon」表示より「Ball&Stick」表示に変更し、単位モデル（ダイマー構造）間の形状の相互位置関係を調整しながら解析モデル全体が、AFM実験像に近似するよう調整します。（右図）



・GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ)によるAFM像シミュレートを行うよう設定します。（右図）

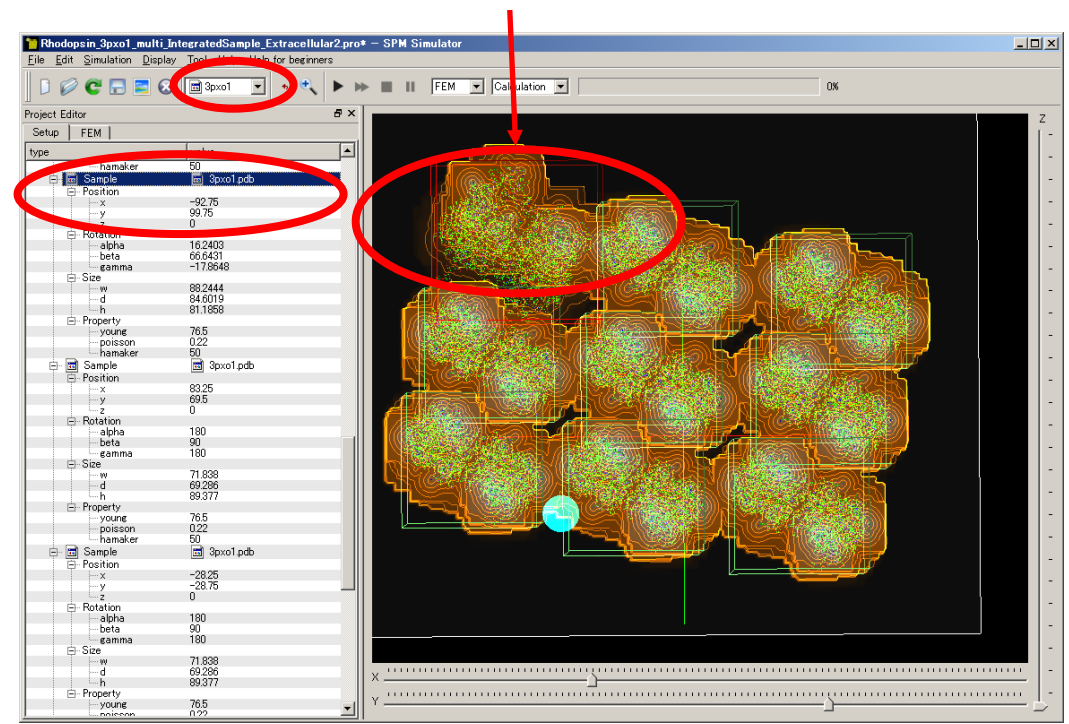


・単位モデルの位置変更と同様に、GeoAFMによるシミュレーションを行ったまま、形状の妥当性を考慮しながらのモデルの位置変更も可能です。移動させたい単位モデルをマウスで選択状態（赤枠表示）にし、“シフトキー” + マウスポック移動でサンプルモデルの平行移動を行います。解析モデル全体が、AFM実験像に近似するよう調整します。（右図）



次ページ回転モデルへ

・単位モデルの位置変更と同様に、GeoAFMによるシミュレーションを行ったまま、形状の妥当性を考慮しながらのモデルの回転も可能です。回転させたい単位モデルをマウスで選択状態（赤枠表示）とし、マウスピック移動のみで、サンプルモデルの回転を行います。解析モデル全体が、AFM実験像に近似するよう調整します。（右図）





## ●GeoAFM RhodopsinのExtracellular surface 計算事例⑥

計算モード識別番号：[GeoAFM\_CalcImage\_Polymer\_013] (b)

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM\\_CalcImage.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM_CalcImage.php)

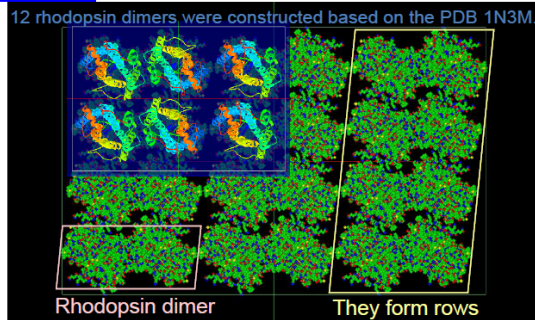
分類：GeoAFM (探針・試料から AFM 像計算)、 $\mu\text{m}$ オーダー、高分子、バイオ  
事例紹介ページを下に示します。

### 【GeoAFM】Rhodopsin の AFM 像

GeoAFM

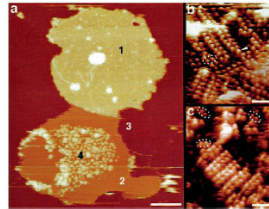
ロドプシンは眼の網膜に存在し、光を認識するためのタンパク質である。ロドプシンはディスク膜中に大量に埋め込まれており、AFMによる観察が行われている。ロドプシンはダイマーの列を形成する。ロドプシン・ダイマー列が形成する準結晶を想定し、ロドプシン・ダイマー12ユニット(水素原子を除いて65904原子)から成るモデルを用意した。

#### Simulation Bird view of the sample.

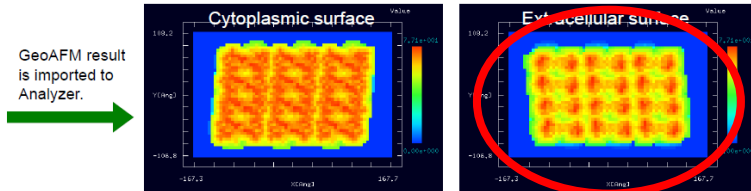


#### Experiment

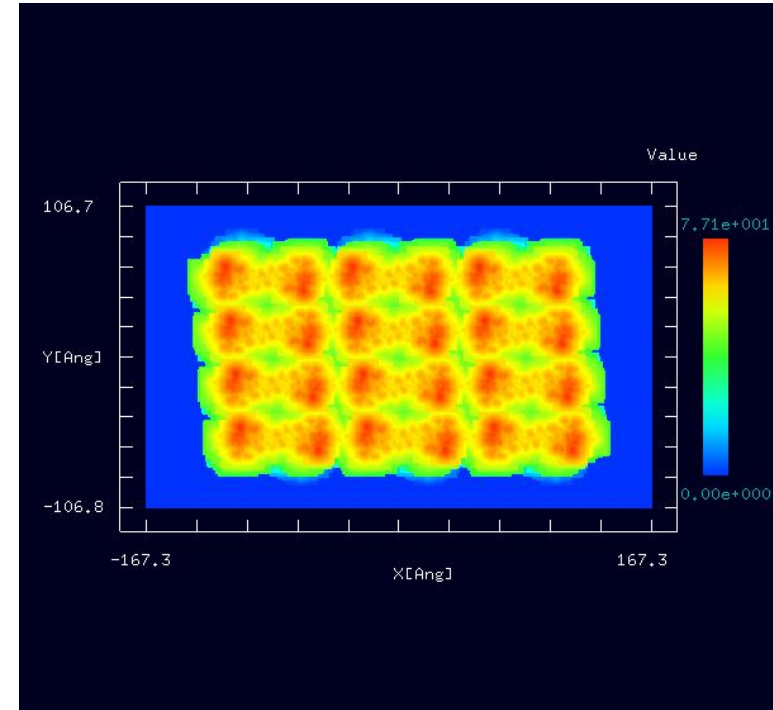
Topography of an open, spread-flattened disk adsorbed to mica and imaged in buffer solution.



Y. Liang et al., J.Biol.Chem. 278 (2003) 21655-21662.



事例紹介ページ



「Analyzer」で[Rainbow]表示にしたシミュレーション結果

探針と試料の形状位置関係のみで計算されます。

スキャンエリアの設定は無効です (wまたはdが0の場合は無効となります)。

周期境界は考慮されません。GeoAFMは、他ソルバ選択中でも、マウス右クリックによるサブメニュー選択で起動できます。

本事例では、眼の網膜にある光受容に特化した、視物質と呼ばれるタンパク質、ロドプシンのAFM像をシミュレートします。

本事例は、Extracellular surfaceの場合です。桿体視物質にある円盤膜 (disk membrane) に含まれるロドプシンの、内側を向いている構造表面のAFM像をシミュレートします。

本事例の試料データ「Rhodopsin\_12units\_1n3m\_SetModel.xyz」は、モデリングツール(SetModel)により、「PDB:1N3M、非対称単位」モデルデータを位置を移動させながら4セット配置したモデルを用い、 $\beta$ 軸で180度回転または、 $\alpha$ 軸と $\gamma$ 軸で180度回転させる事により「Extracellular surface」を解析面としています。「PDB:1N3M」のオリジナルモデルを変更したため、「Cartoon」での表示は出来ません。

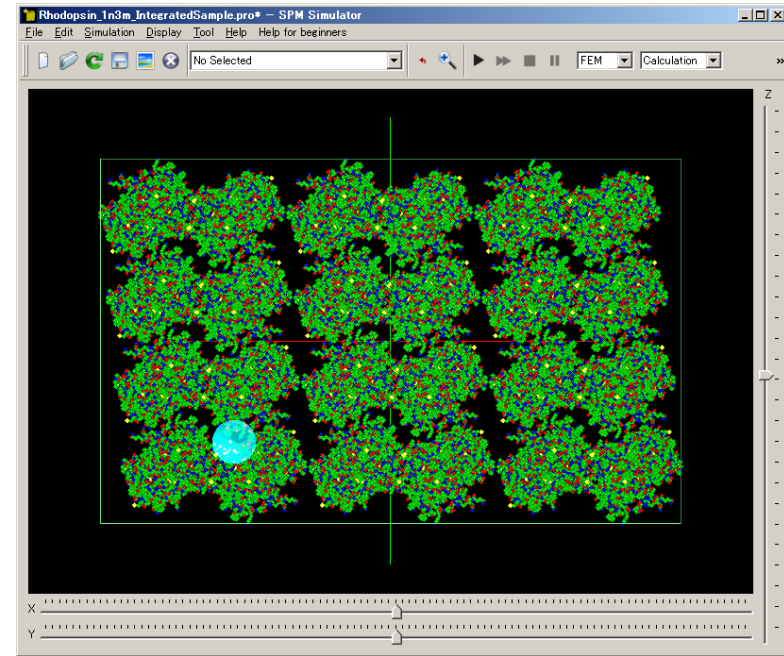
Project Editor

Setup | D:TB

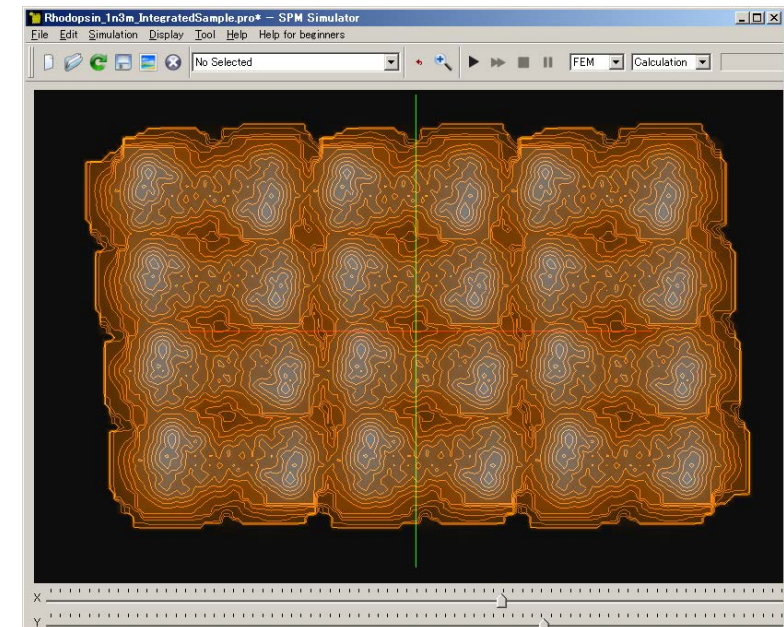
type	value
Component	
Tip	cone
Position	
x	-70
y	-45
z	120
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	19.6299
d	19.6299
h	16
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
ScanArea	
w	0
d	0
h	0
DistanceFromSamples	42.885
Sample	Rhodopsin_12units_1n3m_SetModel.xvz
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	-180
beta	7.01670929853488e-15
gamma	-180
Size	
w	259.61284
d	162.9428
h	77.175
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50

$\beta$  軸で 180 度回転または、 $\alpha$  軸と  $\gamma$  軸で 180 度回転させます。

モデルのセットアップ条件



解析モデルの「Ball」表示



解析モデルのシミュレーション結果

### 3. GeoAFM (高速相互予測AFMシミュレータ) CalcImage (コネクソンの観察)

#### ●GeoAFM 整列したコネクソンのAFM像 計算事例⑦

計算モード識別番号 : [GeoAFM\_CalcImage\_Polymer\_020]

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM\\_CalcImage.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM_CalcImage.php)

分類 : GeoAFM (探針・試料から AFM 像計算)、 $\mu\text{m}$ オーダー、高分子、バイオ

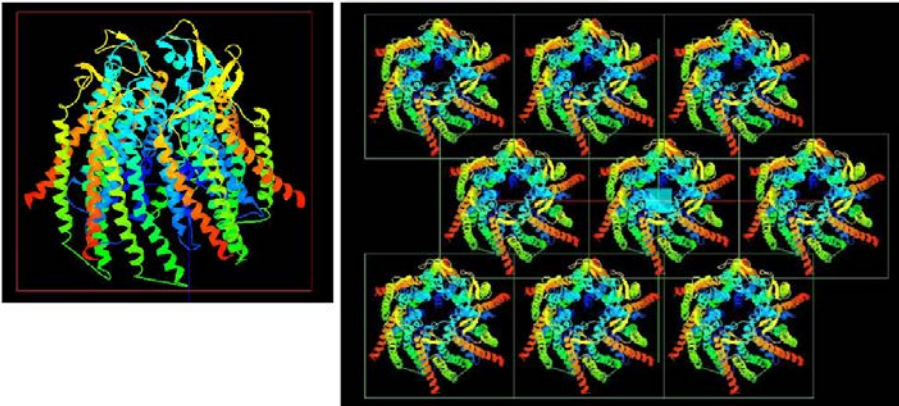
事例紹介ページを下に示します。

バイオ関連

**GeoAFM** 整列したコネクソン(connexon、タンパク質の複合体で細胞間のチャンネルの働きをする)

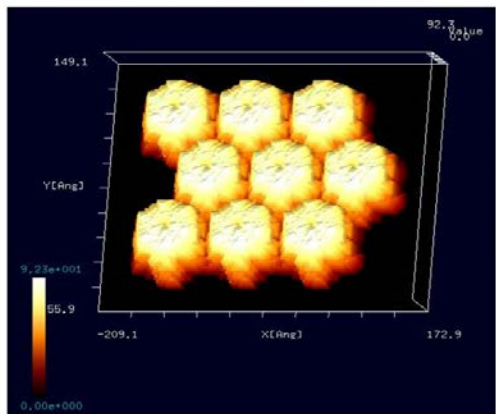
Protein Data Bank (<http://pdj.org/mine/summary/2zw3>)  
2ZW3: Structure of the connexin-26 gap junction channel at 3.5 angstrom resolution

ピラミッド形探針を使用

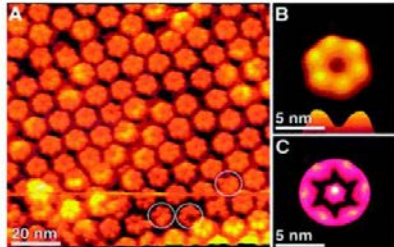


事例紹介ページ

GeoAFMによるAFMシミュレーション画像



AFM実験画像



F. Variola, 'Atomic force microscopy in biomaterials surface science', *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2015, 17, 2950.

実験結果を良く再現

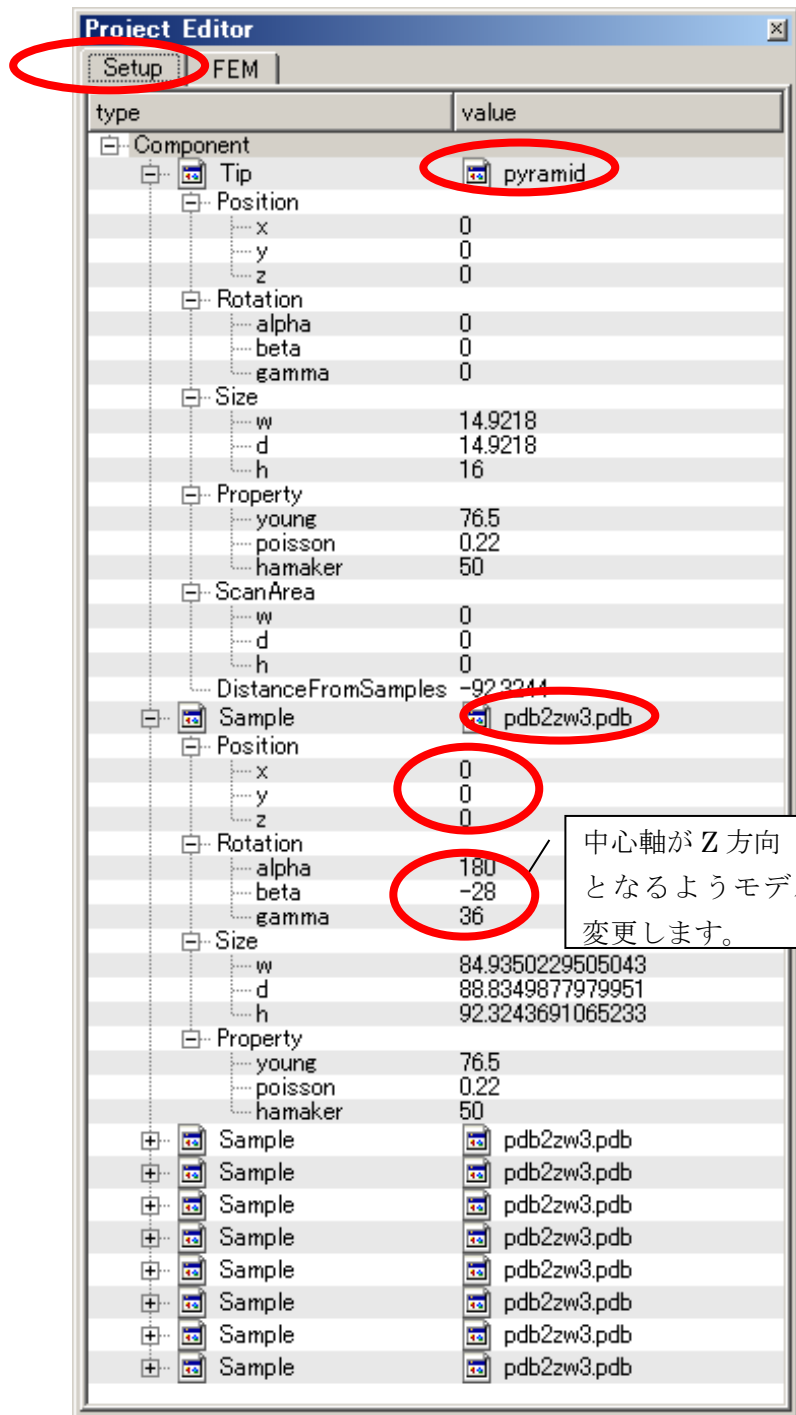
事例紹介ページ2

探針と試料の形状位置関係のみで計算されます。

スキャンエリアの設定は無効です (wまたはdが0の場合は無効となります)。周期境界は考慮されません。

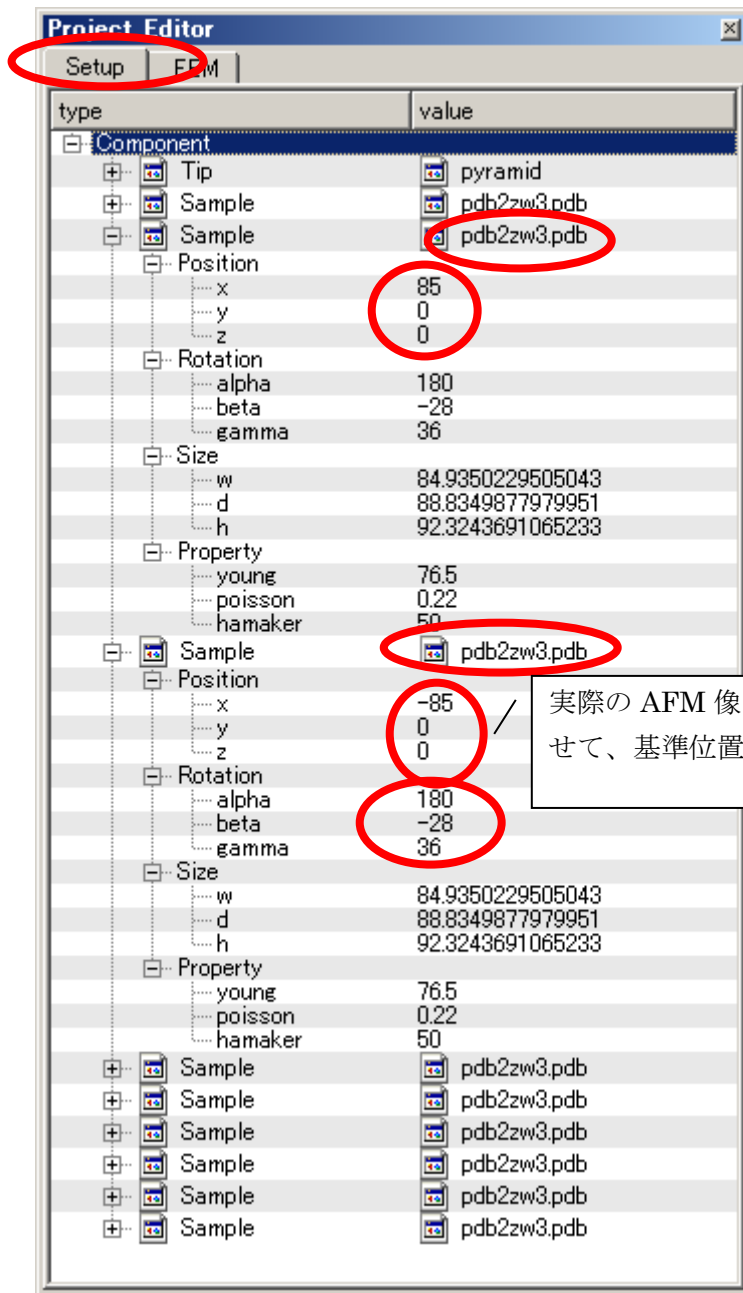
本事例では、整列したコネクソンのAFM像をシミュレートします。

試料は「PDB : 2ZW3」の非対称単位モデルデータを用いています。探針は登録済みデータ「pyramid」(角度 25 度) を用います。



中心軸が Z 方向（垂直方向）となるようモデルの角度を変更します。

設定条件



実際の AFM 像の並びにあわせて、基準位置を変更する。

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

設定条件

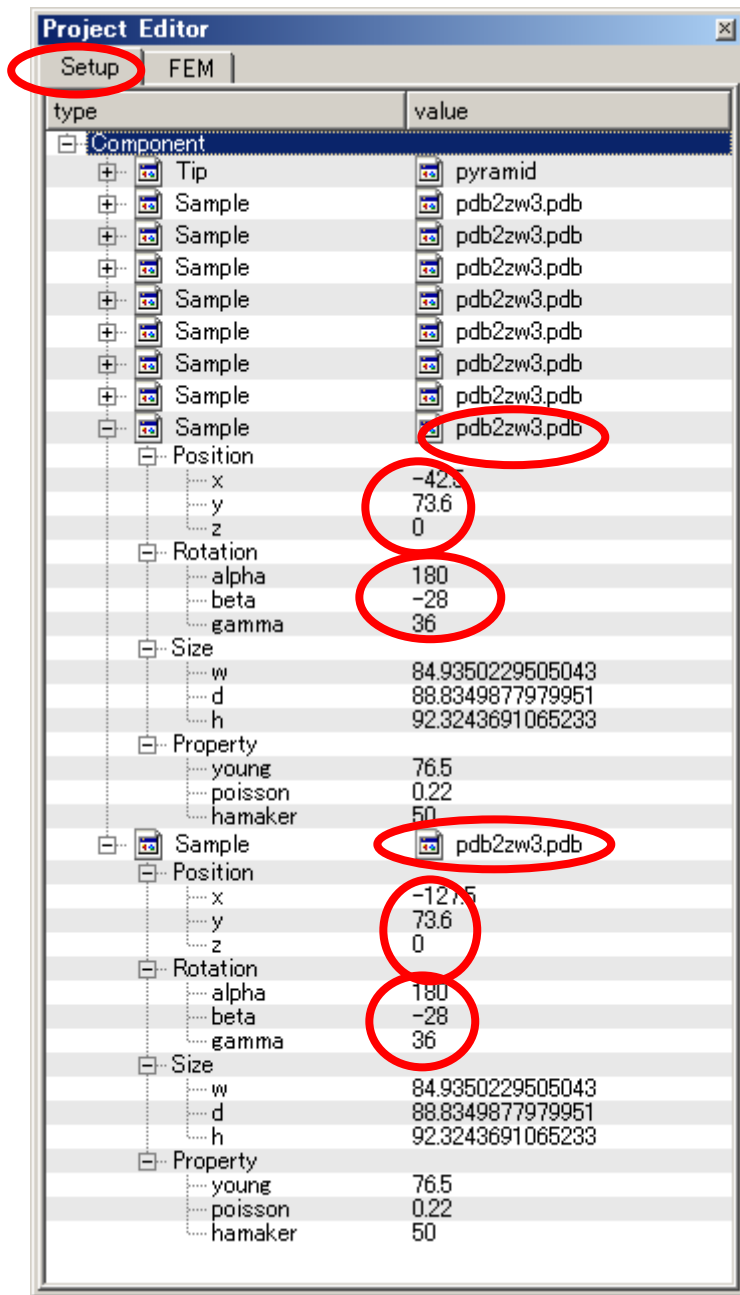
Project Editor Setup FEM

type	value
Component	
Tip	pyramid
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Position	
x	42.5
y	-73.6
z	0
Rotation	
alpha	180
beta	-28
gamma	36
Size	
w	84.9350229505043
d	88.8349877979951
h	92.3243691065233
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
Sample	pdb2zw3.pdb
Position	
x	-42.5
y	-73.6
z	0
Rotation	
alpha	180
beta	-28
gamma	36
Size	
w	84.9350229505043
d	88.8349877979951
h	92.3243691065233
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb

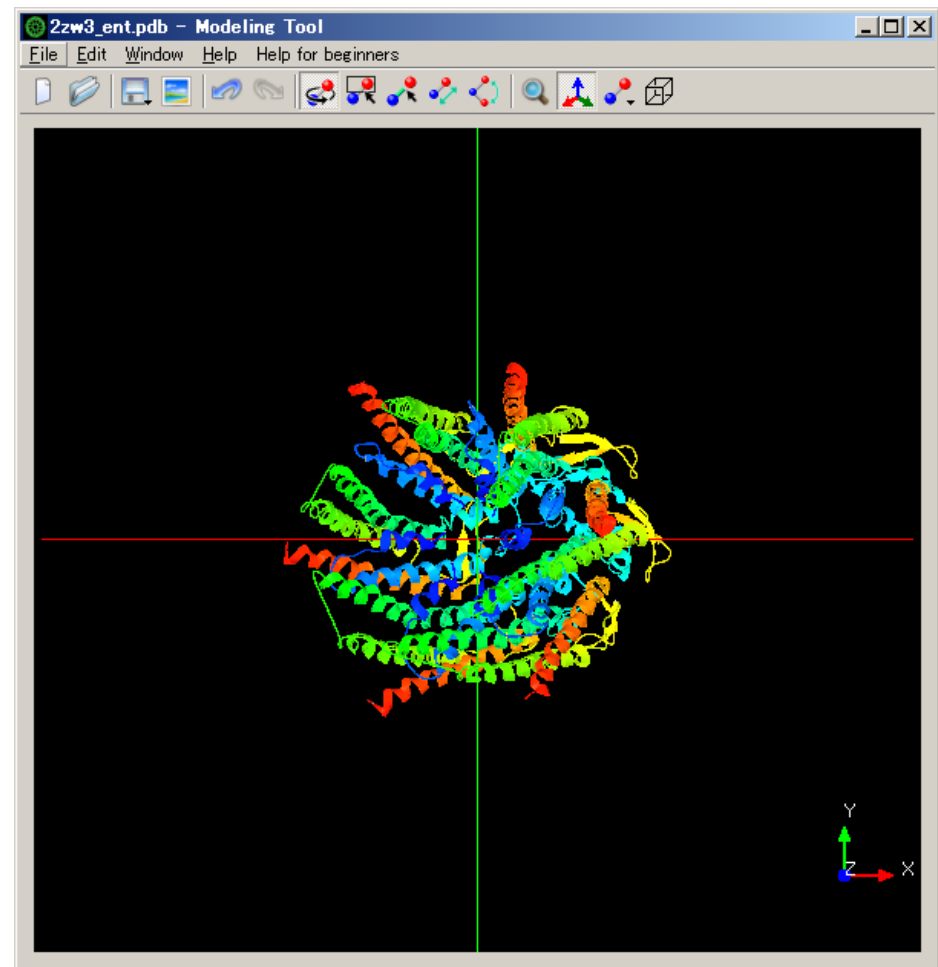
Project Editor Setup FEM

type	value
Component	
Tip	pyramid
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Position	
x	-127.5
y	-73.6
z	0
Rotation	
alpha	180
beta	-28
gamma	36
Size	
w	84.9350229505043
d	88.8349877979951
h	92.3243691065233
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
Sample	pdb2zw3.pdb
Position	
x	42.5
y	73.6
z	0
Rotation	
alpha	180
beta	-28
gamma	36
Size	
w	84.9350229505043
d	88.8349877979951
h	92.3243691065233
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb
Sample	pdb2zw3.pdb

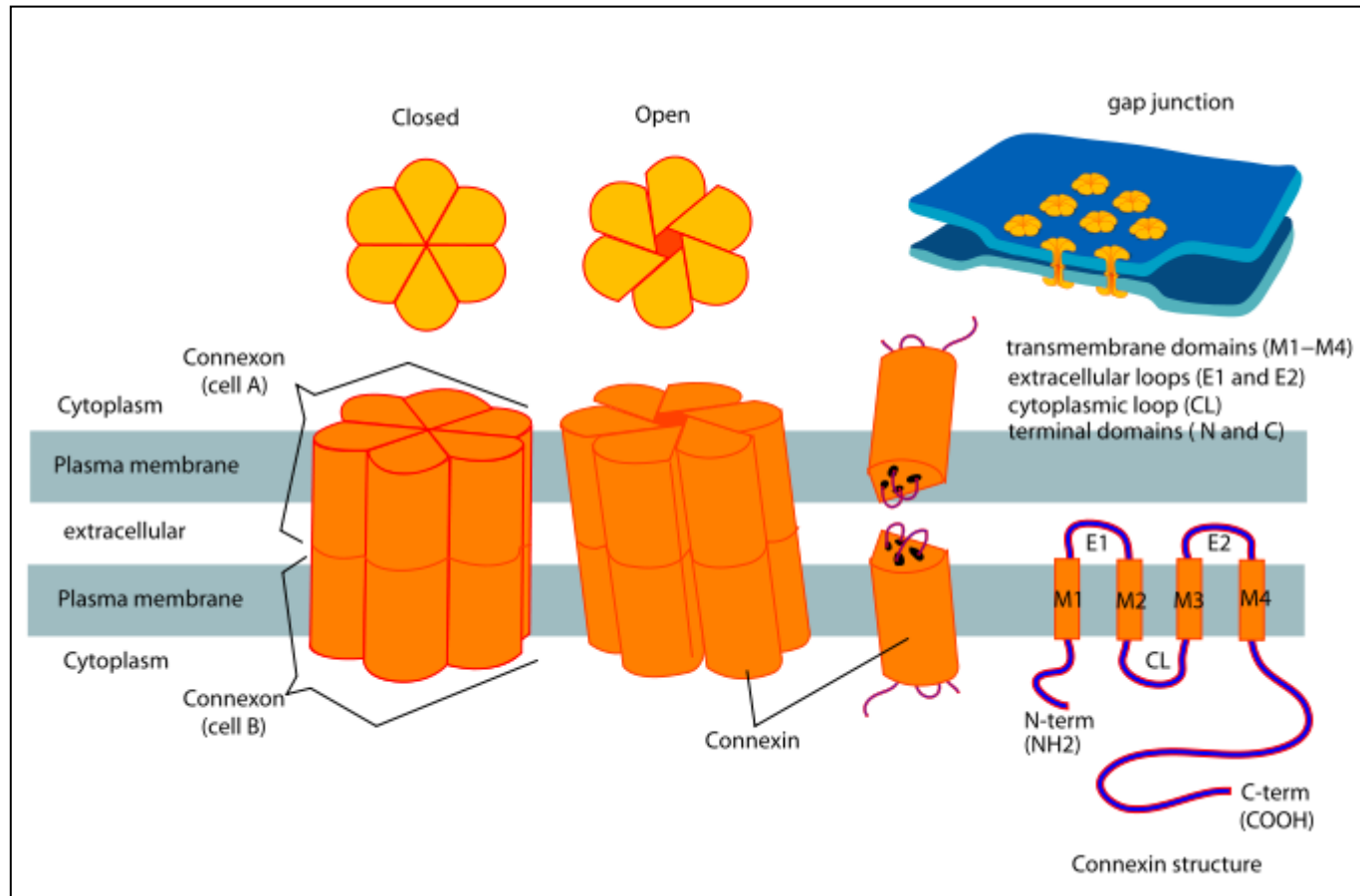
設定条件



設定条件



PDBデータ“2ZW3”ダウンロード時の3D構造表示



(図 : wikipediaより)

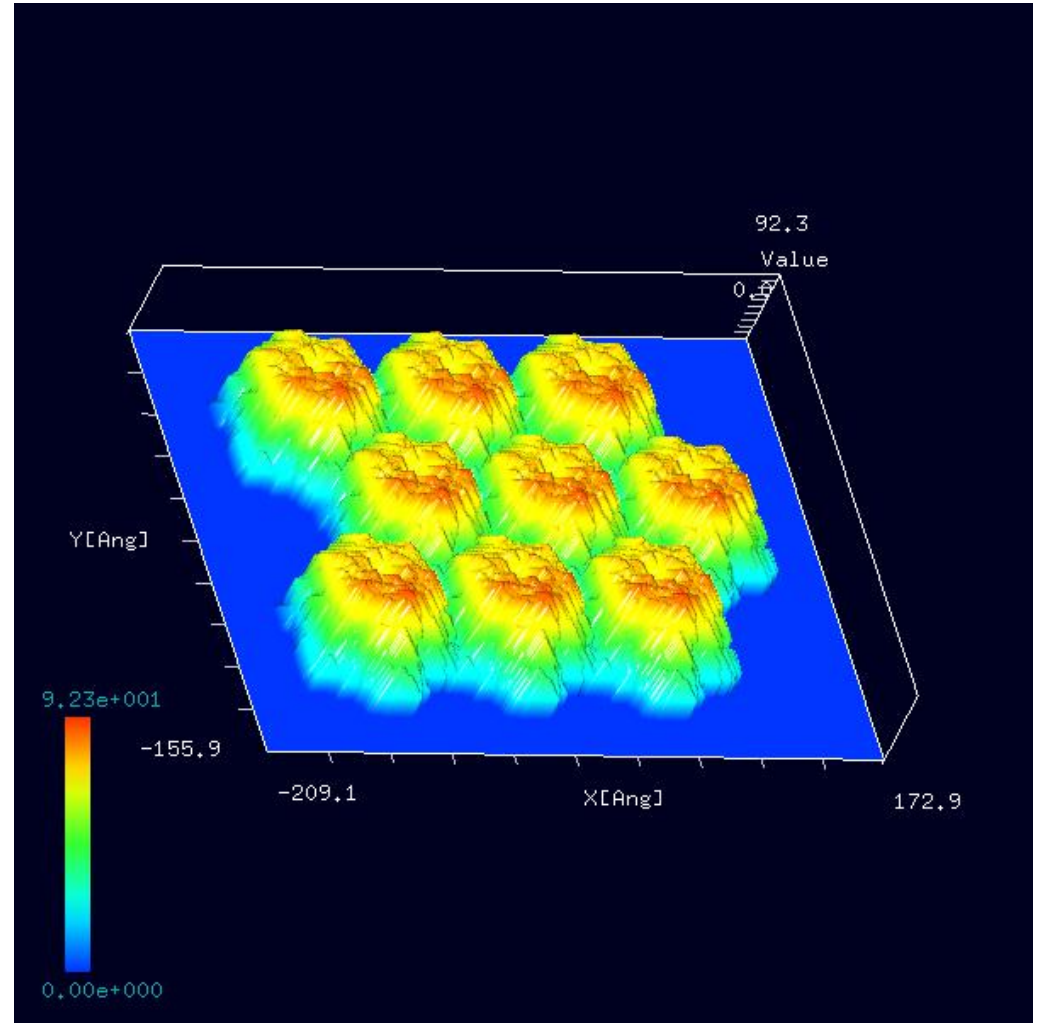
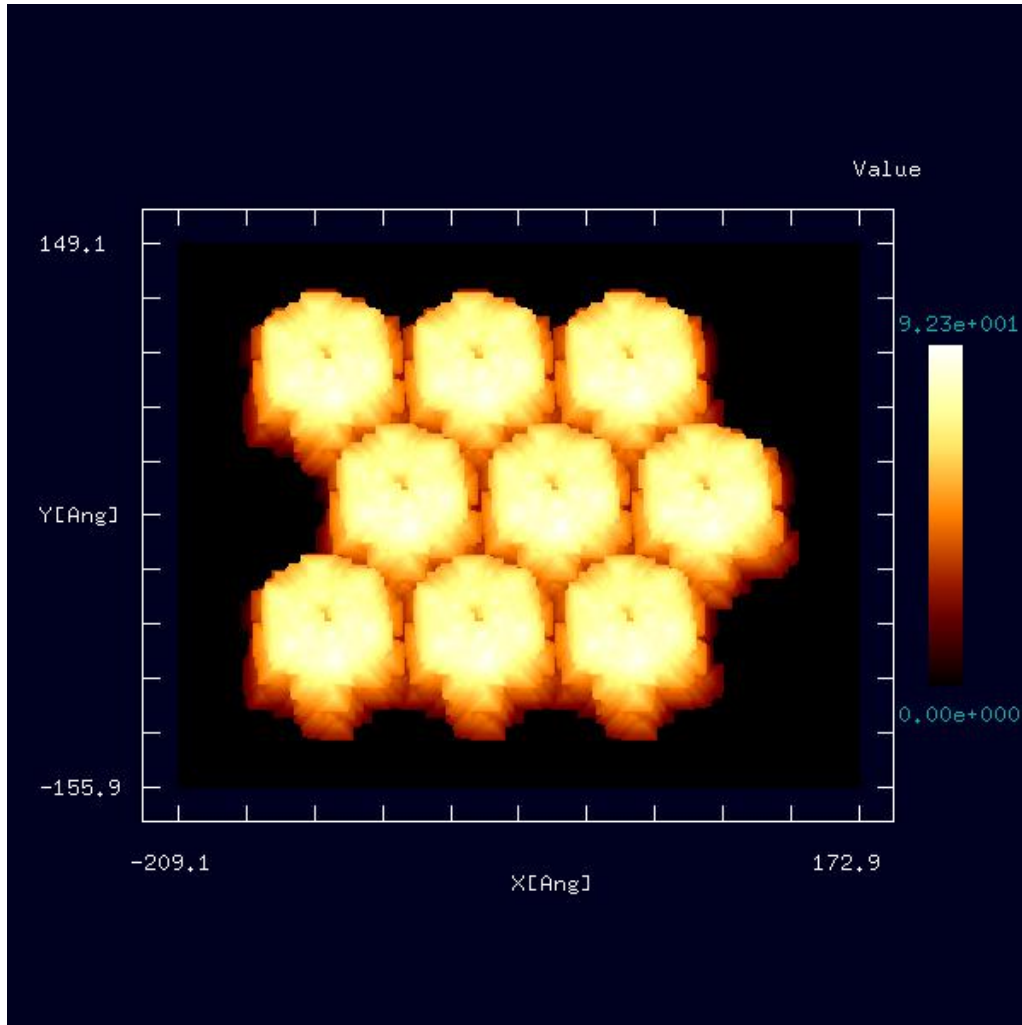
### ・コネクソンの解説

コネクソン (Connexon) は、コネクシンと呼ばれるタンパク質 6 つの複合体で、2 つの隣接細胞の細胞質同士を繋ぐギャップ結合の一部となる。コネクソンは実際には、片側結合の半チャンネルで、通常は逆向きの 2 つのコネクソンが対となって、完全な細胞間ギャップ結合チャンネルとなる。しかしいくつかの細胞では、半チャンネル自体が細胞質と細胞外を繋ぐ導管となり、イオンや 1-2kDa 以下の小分子を移動させる。(wikipedia)

注) Da (ダルトン、ドルトン [dalton]) : 原子や分子のような微小な粒子の質量を表す単位。静止して基底状態にある自由な炭素 12 ( $^{12}\text{C}$ ) 原子の質量の  $1/12$  と定義されている。1 u (統一原子質量単位、**unified atomic mass unit**) と 1 Da は定義が同じ。

コネクソンの小孔は、チャンネルの壁に並ぶ 6 つのアミノ末端ヘリックスにより形成されるじょうごの部分で狭くなり、そこがチャンネル入り口となって、通過できる分子サイズを決定している。Cx26 ギャップ結合チャンネルの構造は、ギャップ結合の両端での電圧を感知してチャンネルが開閉することを示唆している。(コネクシン 26 ギャップ結合チャンネルの 3.5 Å 分解能の構造 Nature 458, 7238 | Published: 2009 年 4 月 2 日 | doi: 10.1038/nature07869 より)

実験データ画像処理プロセッサ「Analyzer」でのシミュレーション結果表示を以下に示します。  
左図は、「Gradation」表示で、右は3D-Viewによる「Rainbow」俯瞰表示となります。





## 類例：生物学的単位でのコネクソンのGeoAFMによるAFM像シミュレーション 計算事例⑧

計算モード識別（番号）プロジェクト名：[project\\_file\\_for\\_beginners\\_version\\_GeoAFM\\_CalcImage\\_Polymer\\_020](#)

紹介事例では、試料は「PDB：2ZW3」の非対称単位モデルデータを用い、広がり少ない側のAFM像をシミュレートしました。

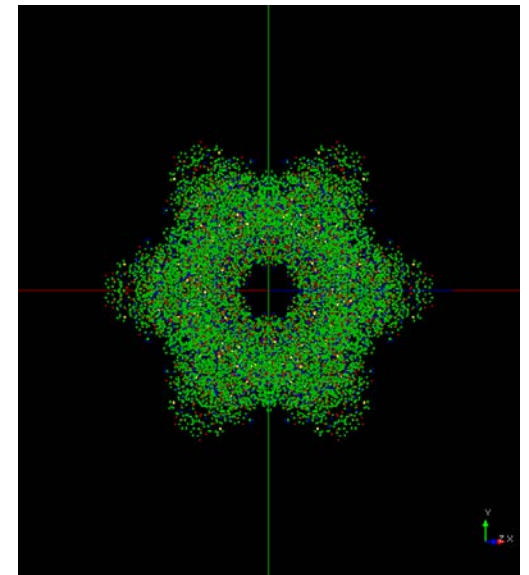
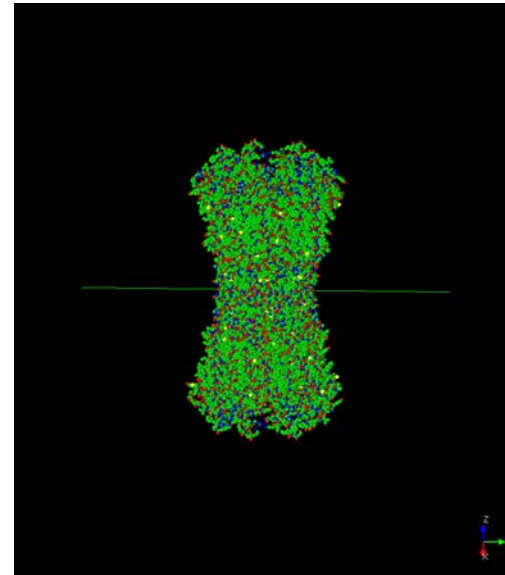
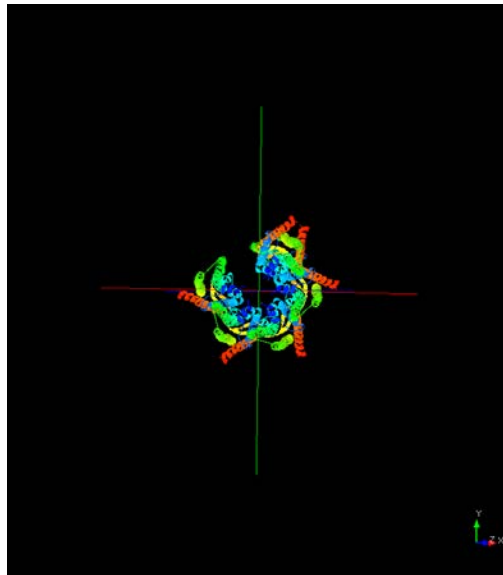
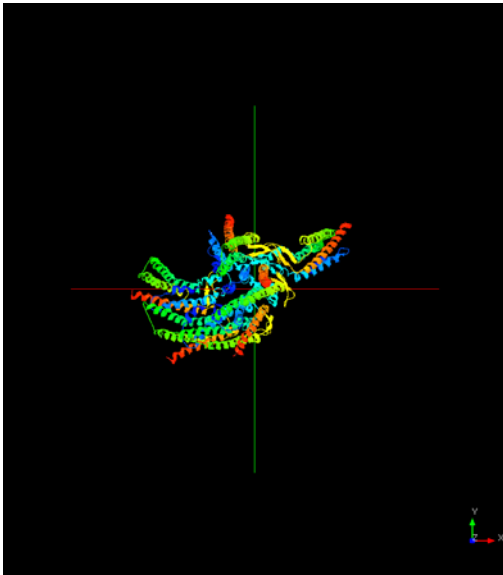
参考事例として、試料を「PDB：2ZW3」の生物学的単位モデルデータを用いてAFM像をシミュレートします。下図に示すように、

「Cartoon」表示では、非対称単位モデルデータと近い形に見えますが、「Ball」表示では、「Cartoon」表示では隠れていた部分も表示します。

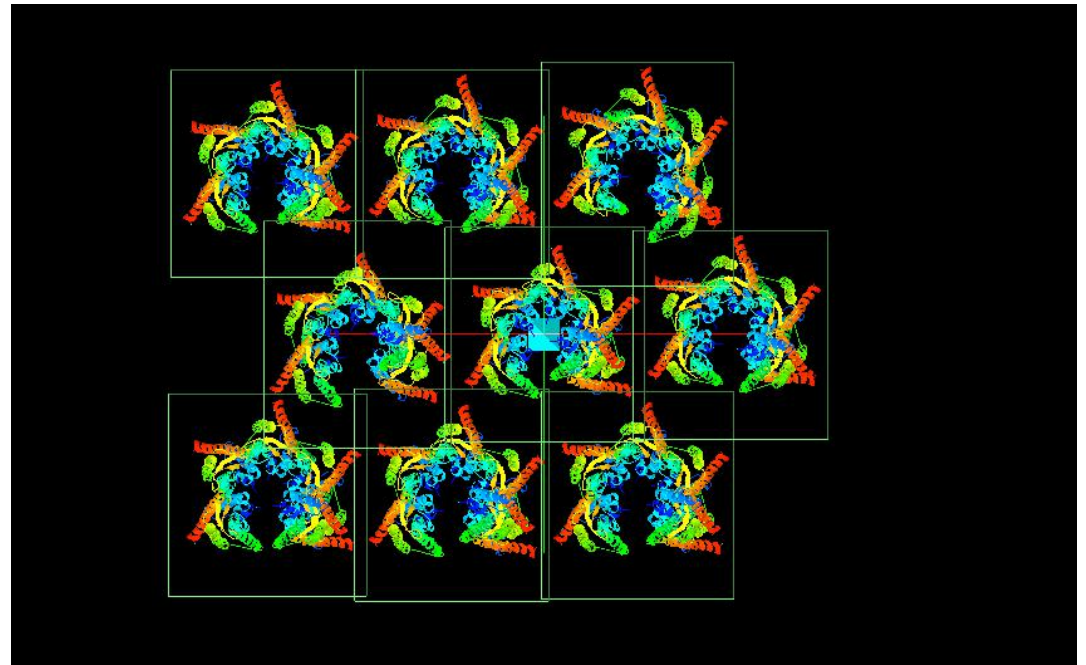
生物学的単位モデルデータでは、逆向きの2つのコネクソンが対となっているデータとなります。

生物学的単位モデルデータを用いることで、広がり大きい側のAFM像をシミュレートする事になります。

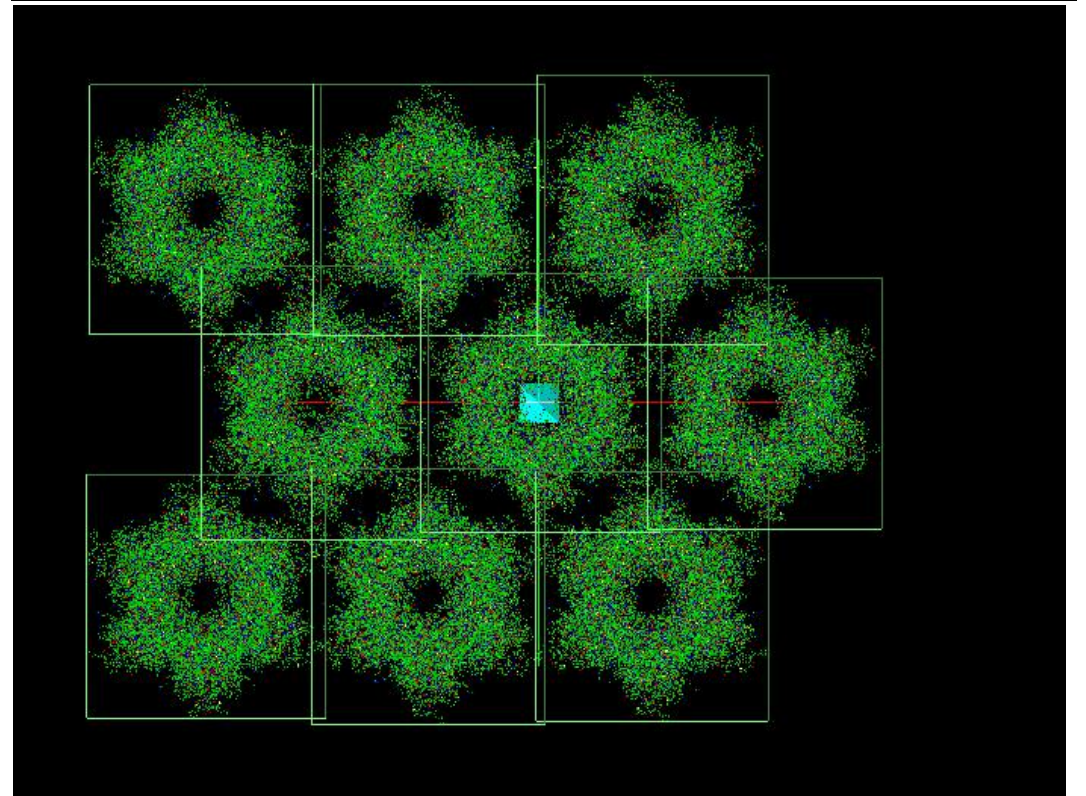
「2ZW3」の生物学的単位モデルデータを読み込んだ直後の「Cartoon」表示（左図）、「2ZW3」の生物学的単位モデルデータを中心軸方向に回転させた場合の「Cartoon」表示（中央左図）、中心軸の垂直方向より見た「Ball」表示（中央右側）、中心軸方向より見た「Ball&Stick」表示（右側）を示します。



試料は、紹介事例の非対称単位モデルデータ「2ZW3」の代わりに、  
生物学的単位モデルデータ「2ZW3」を置き換え、  
中心軸をTOP方向に向けることでAFM実験像に近い状態になります。  
右上図に解析モデルの「Cartoon」表示を示します。



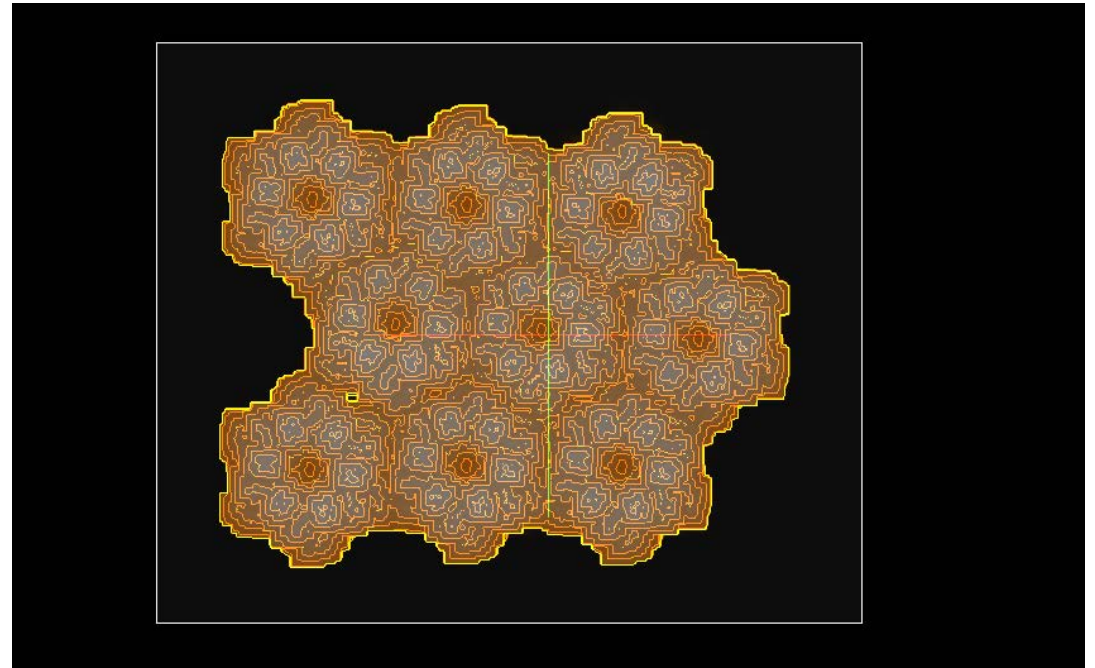
右下図に解析モデルの「Ball&Stick」表示を示します。  
中心軸に沿って、空洞が見える位置に回転している事が  
判ります。



右図にシミュレーション結果を示します。

解析結果表示画面で、マウスを右クリックする事により、サブメニューが表示されるので

「GeoAFM」 → 「Export Simulated Data」 を選択し、「cube」ファイル名を入力後、保存します。

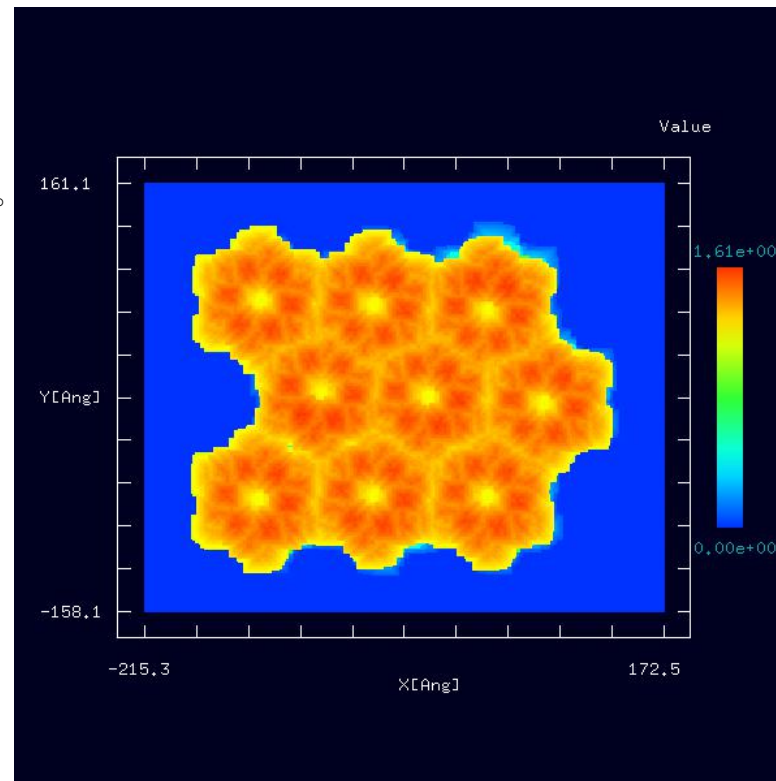


メニュー「Tool」 → 「Analyzer」 を選択し、

実験データ画像処理プロセッサ「Analyzer」を起動します。

「Analyzer」で、前記「cube」ファイルを選択し、画面に表示します。

「Analyzer」による2D-View「Rainbow」（右下図）を示します。

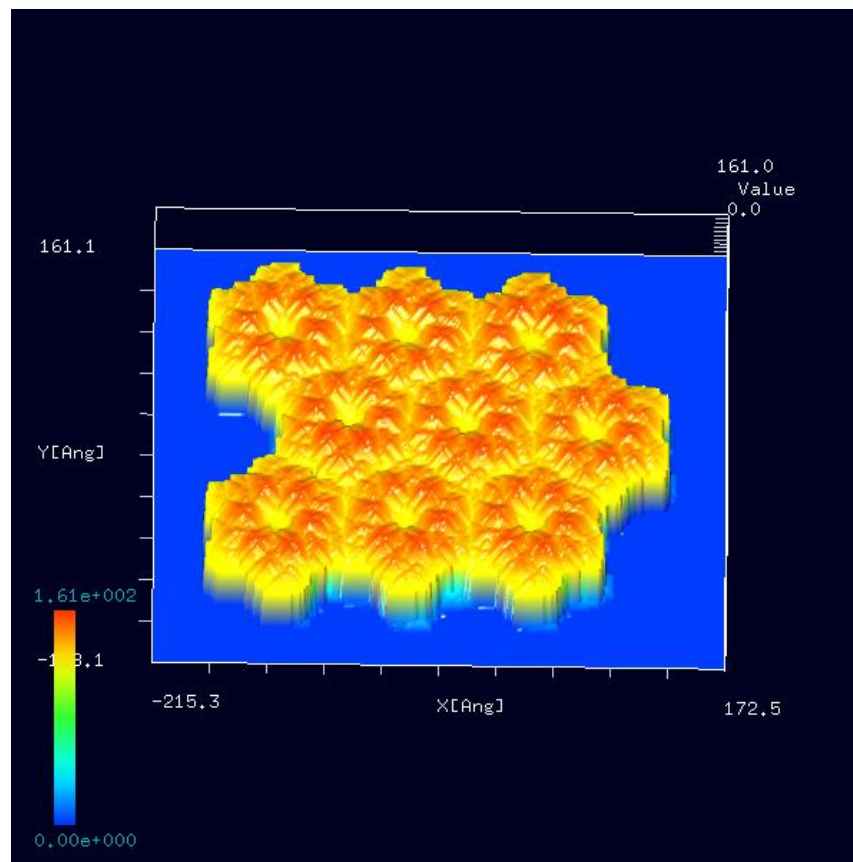


「3DView」及び「Color」→「Rainbow」を選択し、表示方向を俯瞰しやすい方向に変更します。

「Analyzer」による俯瞰3D-View「Rainbow」（左図）を示します。

紹介事例での、「PDB：2ZW3」の非対称単位モデルデータに比べて、開口部の模様が大きく、はっきりしていることが判る。

「PDB：2ZW3」モデルデータは、OPEN状態のモデルであり、CLOSE状態のモデルデータも参考としたかったが、適当な参考試料がなかったため、今回は割愛した。



6・本編でのSPMシミュレータにおけるソルバー一覧 (事例として取上げたソルバー・モード・機能を赤字で示しました)

●：対応済	×：未対応					
V20170313	V20160722	ソルバー	モード1	モード2	モード名称	機能・その他
●	●	GeoAFM				探針形状、試料形状、AFM像の幾何学法による交互予測AFMシミュレーション  ポップアップ・メニュー[GeoAFM] → [Show Simulated Sample]で表示
●	●	Analyzer				実験データの画像処理プロセッサ  走査型プローブ顕微鏡(SPM)実験装置から直接出力されるデータファイルを読み込む  基板面の傾き補正  探針形状推定と探針影響除去  コントラストの調整(ガンマ補正)