## 神戸大学医学研究科

# バイオメディカルサイエンス専攻

# 細胞分子医学特論

# 蛋白質構造モデリング

2009年5月19日(水) 17:30~19:00

於:神戸大学医学部 情報センター第二端末室

神戸大学大学院医学研究科 構造生物学分野・特命教授 廣明 秀一 CONTENTS :

- Windows パソコンを利用した蛋白質アミノ酸配列のマルチプルアライメントの作成
- 1. 蛋白質のホモロジーモデリング(初級編)
- 2. 蛋白質の立体構造の可視化(初級編)

本日の手順 PC の準備 PC を起動する

本日の目標

ヒトAspp1のSH3ドメインのホモロジーモデリングをモデリングソフトで標準 的な modeller を用いて行う。(ただし教材の都合で、本日は modeller version 7v7 を用いる。最新版は 9v6。)

そのために、 1. アミノ酸配列をとってくる。 http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez?db=Protein&itool=toolbar

2. テンプレートとなるもっとも近い既存の立体構造を探す。 http://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi?PAGE=Proteins&PROGRAM=blastp& BLAST PROGRAMS=blastp&PAGE TYPE=BlastSearch&SHOW DEFAUL TS=on&LINK LOC=blasthome

3. PDBファイルをとってくる。

4. modeller を動かすための配列アライメントファイルを作成する。 http://clustalw.ddbj.nig.ac.jp/top-j.html

- 5. modellerの入力ファイルを作成する。
- 6. modeller を動かす。
- 7. できたモデル構造を MOLMOL で表示させる。
- 8. MOLMOL で蛋白質の表面構造を描画させる。

おしまい。

### 細胞分子医学特論

2010年5月 神戸大学 BMS・構造生物学テキスト

廣明 秀一

### modeller を使ったホモロジーモデリング

### ホモロジーモデリングの概要

ホモロジーモデリングとは、立体構造が解かれていない蛋白質の立体構造(タ ーゲット)を、類縁蛋白質の立体構造(テンプレート)を元に構築する手法である。 その際の基本原理は「配列が似た蛋白質の立体構造は似ている」という経験則で ある。どれぐらい配列が似ていれば信頼できるモデルを構築できるかは、構築した い蛋白質の種類や参照できる類縁蛋白質の数に強く依存するので一概には言え ないが、ホモロジーモデリングにおけるモデルの信頼度はターゲットとテンプレート との間の配列のアライメントのよしあしでほぼ決まる。配列のアライメントの信頼性は、 目安としては**最低30%以上の配列一致度**を持つ場合でないと信頼できるアライメ ントが構築できないのでホモロジーモデリングを行う際も同程度の配列一致度がモ デルの信頼度の目安となる。

現在ポストゲノムプロジェクトの一環として、構造ゲノムプロジェクトが進行している。このプロジェクトではすべての蛋白質ファミリー毎に代表を選びその立体構造 を明らかにすることを目指している。しかしすべての蛋白質の立体構造が明らかに されるわけではないので、実際に研究に利用している蛋白質の立体構造情報が欲 しいときには、最終的には X 線結晶解析や NMR による詳細な構造が必要になる かも知れないが、とりあえずはホモロジーモデリングにより構造情報を得ることが最 初のステップとなることが多くなる。このような流れを受けて、ホモロジーモデリング の重要性は非常に高まりつつある。 ホモロジーモデリングの手法はすでに数多くの方法が考案されており、市販品 も含め数多くのプログラムを利用することができる。また最近では Web interface を 利用したプログラムも利用できるようになってきており一昔前に比べるとモデルを構 築する手間は格段に少なくなっているが、ここでは、大枠だけでもモデリングの中 身まで理解しながらモデリングの手法を試してみるために、modeller というコマンド ラインベースのプログラムを利用する方法を説明する。

なお、今回の実習では、human Aspp1 の SH3ドメイン(CAC83011, 1020-1080) をターゲットに、そして Aspp2 (PDB: 1ycs)をテンプレートとしてホモロジーモデリン グを行う。なお、今回は時間の都合上ターゲットの選択は省略するが、似た配列を 持つ構造でも結晶解析の都合上微妙に配列が違うことがあるので、実際にターゲ ットを選ぶ際は単純に解像度のよしあしだけでなく実際にアライメントを作ってみて 構造にかけている部分の有無をよくチェックする必要がある。興味がある人は実際 に今回テンプレートにした、1ycs とほとんど配列が同じ 2vge を詳細に比べてみると よい。また、modeller では複数の構造をテンプレートにすることもできるが今回は省 略する。興味がある人は、1ycs, 2bge の両方をテンプレートにモデルの構築を行っ てみるとよい。

### MODELLER

modeller は Sali らにより1994年に開発されたプログラムであるが、現在も多く の改良が加えられ、最新のバージョン 9v6 は 2009 年の 2 月に公開されたところで ある。プログラムは実行形式で http://guitar.rockefeller.edu/modeller/modeller.html より取得でき、研究機関では無料でライセンスを取得することが利用することができ る。

今回の実習では、modeller7v7を使用する。

modeller の利用に必要な入力ファイル

- (1) マルチプルアライメント
- (2) テンプレートとなる PDB ファイル
- (3) modeller  $\mathcal{O}$  input file (\*.top)
  - これらのファイルを用意した後、コマンドラインで

mod7v7 inputfile.top

で計算が行われる。

### (1) マルチプルアライメントのファイルの準備

まず、ターゲットの配列と、テンプレートの配列を含むマルチプルアライメントを 作る。このとき、モデルを組みたい配列と構造のわかっている配列以外の配列が入 っていてもかまわない。たとえば、配列Aを構造D,E,Fからモデリングしたいときに、 アライメントの精度を上げるために配列 B,C を入れたほうがよければ、入れてもよい。 ここでは ASPP1-SH3 の配列の一部(1020-1080)と 1ycs の配列を FASTA format でひとつのファイルに準備する。

<例: aspp.fasta>

P	aspp.fasta	
	>ASPP1-SH3 NKGVAYALWDYEAQNSDELSFHEGDALTILRRKDESETEWWWARLGDREGYVPKNLLGI >gi 2781309:169-229 Chain B, P53-53bp2 Complex NKGVIYALWDYEPQNDDELPMKEGDCMTIIHREDEDEIEWWWARLNDKEGYVPRNLLGI	LYP LYP
5		$\geq$

これを clustalw を利用して、modeller 用のアライメントファイルに似た NBRF/PIR フォーマットでのアライメントを得る。

% clustalw all.seq -output=pir

この結果、aspp.pirというファイルが得られる。

今回は WEB 上のサービス(DDBJ サーバ)を利用する。

http://clustalw.ddbj.nig.ac.jp/top-j.html

この結果、得られたアライメントを aspp.pir というファイルに保存する

P	aspp.pir
	>ASPP1-SH3 NKGVAYALWDYEAQNSDELSFHEGDALTILRRKDESETEWWWARLGDREGYVPKNLLGLYP >gi 2781309:169-229 Chain B, P53-53bp2 Complex NKGVIYALWDYEPQNDDELPMKEGDCMTIIHREDEDEIEWWWARLNDKEGYVPRNLLGLYP
- P	

modeller で使うためにはこれにさらに手を加えて、以下のようにする。

pd	aspp.ali	
	>P1;ASPP1-SH3 sequence:ASPP1-SH3:1020:A:1080:A:::: NKGVAYALWDYEAQNSDELSFHEGDALTILRRKDESETEWWWARLGDREGYVPKNLLGLY *	2
	>P1;1ycs structureX:1ycs:169:B:229:B:::: NKGVIYALWDYEPQNDDELPMKEGDCMTIIHREDEDEIEWWWARLNDKEGYVPRNLLGLY *	2
TB		>

変更点は、sequence ないしは structureX で始まる行を加えただけである。この 行は、modeller に配列の長さやテンプレートにする PDB ファイルの名前を知らせる 重要な行でありそのフォーマットは、

header:名前:残基番号のはじまり:chain id:残基番号の終わり:chain id: ::::

である。header は sequence or structureX のこと。名前は、structureX の場合は名前.pdb のファイル名を指示することになる。sequence の場合は特に意味はない。残 基番号の始めと終わりは PDB の残基番号を書く。chain id が必要ない場合は空白か"@"で埋める。最後の":"で区切られた 4 つのフィールドは特に利用されないの で適当にコメントを書くことができる。

### (2) テンプレートにする PDB ファイルの準備

テンプレートにする PDB のファイルで気をつけることはそのファイル名のつけ方の規則である。アライメントファイルで structureX の次のフィールドに書いた名前.pdb でセーブする。今の例だと 1ycs.pdb になる。

📱 *aspp.top 🕷				
#aspp.top				
INCLUDE				
SET ALNFILE = 'aspp.ali' #ファイル名を正しくいれる				
SET SEQUENCE = 'ASPP1-SH3' #名前をいれる				
SET KNOWNS = '1ycs' #PDBファイル名 拡張子なし 大文字小文字注意				
SET ATOM_FILES_DIRECTORY = '.'				
SET STARTING_MODEL = 1 #				
SET ENDING_MODEL = 5 #				
SET DEVIATION = 5.0 #				
SET RAND_SEED = 20070512				
CALL ROUTINE = 'model'				

(3)modeller のインプットファイルの準備

例を通じて説明する。

<例:modeller のインプットファイル: aspp.top>

インプットファイルの名前に拡張子は無くてもいいがつけるときは".top"をつける。

「説明」

"#"から行の終わりまではコメント。

SET hoge = '-----' で hoge という変数に-----を代入するというのが基本的な構文。 あとは、CALL ROUTINE = '------'(ここの例では model) でもデラーの振る舞いを指 定する。今回の例ではモデルを作ることしかしないが、modeller 自体は多機能で、 配列の類似性検索によるターゲットの選択やマルチプルアライメントの構築なども できる。ただ、ホモロジーモデリングは配列のアライメントがすべてなので、実際に 研究に用いるときは、clustalw のような専用のプログラムの助けを借りて手でアライ メントを修正してでもちゃんとしたアライメントを作ることに注力すべきである。

赤光, 卢	
发剱名	記明
ALNFILE	(1)で準備したマルチプルアライメントを指定
KNOWNS	テンプレートの PDBを指定する。指定方法は後
	述
SEQUENCE	ターゲットの配列を指定。指定方法は後述
ATOM_FILES_DIRECTORY	KNOWNS で指定した PDB ファイルがある
	ディレクトリ
DEVIATION	複数のモデルを作るときにどれぐらい離れてい
	るモデルを作るかを r.m.s.d(Å)で指定。小さい
	ほど似た モデルが作られる
STARTING_MODEL	複数のモデルを作る時の最初のモデルの番号
ENDING_MODEL	複数のモデルを作る時の最後のモデルの番号

この例で登場する重要な変数

### 「テンプレートとターゲットの指定方法」

modeller の input file の中で指定する KOWNS と SEQUENCE で使う名前は、マ ルチプルアライメントのファイルの中の>P1;-----の";"以降の文字列。今回の例で は、配列では"ASPP1-SH3"、構造では、"1ycs\_A"である。なお、構造ではさらに座 標情報として PDB ファイルを指定する必要があるが、これはアライメントファイルの 準備のところで述べたとおり structureX の次のフィールドに.pdb の拡張子を除いた ものを書く。(今の例だと 1ycs と書いて、ATOM\_FILES\_DIRECTORY に 1ycs.pdb というファイルを置く。ファイル名は必ず小文字であることに注意)。

### modeller の出力ファイル

以上のようにして必要なファイルが全部そろったら、linux ではコマンドラインから、Windows では MS-DOS プロンプトから

### mod7v7 aspp.top

と打ては動く。ちゃんと動くと、aspp.top があるのと同じディレクトリ(フォルダ)に ところに今の例だと ASPP1-SH3.B\*\*\*\*, ASPP1-SH3.V\*\*\*\*, ASPP1-SH3.D\*\*\*\* (ASPP1-SH3 はターゲット配列の名前)、\*\*\*\*は STARTING\_MODEL から ENDING\_MODEL の番号が入る。最終的に欲しいのは出来上がった構造が収め られている ASPP1-SH3.B\*\*\*のファイルで、フォーマットは PDB format。V\*\*\*\*と D\*\*\*\*という拡張子をもつファイルはそれぞれ、条件を満たしていない度合いを残 基ごとに表現したファイルと、モデルをつくる拘束条件を記した中間ファイルである が詳細はマニュアル参照。

### 最終結果の選択

modeller では、テンプレートを基にしたターゲットの配列の残基の距離の拘束 条件を主に利用してモデルを構築する(その他原子の衝突のペナルティーなどさ まざまな要素が入っているが詳細は省略)。そのため拘束条件を満たす構造は一 つではなく複数存在する。ただそれぞれのモデルごとに拘束条件の満たす具合が 異なるので、できるだけよく拘束条件を満たしているモデルを最終構造とするのが 望ましい。本来ならば拘束条件を最も良く満足する構造を構築するのがベストなの だが蛋白質のように自由度の高い系において全探索を行うことは現実的には不可 能なので指針としては、できるだけ多くのモデルを構築した上でもっとも良い構造 を採択し、そのモデルが procheck などの構造検証プログラムでもっともらしいかどう かをチェックし手最終的な構造を選択することになる。ここでは構造の検証プログラ ムについては触れないで、modeller が構築したモデルのよしあしの度合いの目安 だけ説明する。各モデルのファイル(ASPP1-SH3.B\*\*\*\*)の2行目には

REMARK MODELLER OBJECTIVE FUNCTION: 445.6120 という記述がある。この OBJECTIVE FUNCTION というのが拘束条件を満たしてい る度合いを示しており、値が小さいほどよい。

LINUX 端末では、egrep と sort を利用してもっとも小さい値を持つ構造を選択する ことが、たった一行のコマンドでできる。

egrep OBJECTIVE ASPP1-SH3.B9999\* | sort +4n とすると、(modeller の範囲内で)良いモデルから順にリストアップされる。 Windows ではいちいちファイルを確認しなければならない。

	res	ult		
hGluR1.B99990009:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1165.6120
hGluR1.B99990006:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1176.3200
hGluR1.B99990005:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1190.5450
hGluR1.B99990008:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1194.9890
hGluR1.B99990010:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1195.2774
hGluR1.B99990003:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1234.1530
hGluR1.B99990001:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1243.1622
hGluR1.B99990002:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1264.4180
hGluR1.B99990007:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1331.5550
hGluR1.B99990004:REMARK	MODELLER	OBJECTIVE	FUNCTION:	1358.5623

細胞分子医学特許

2010年5月 神戸大学 BMS・構造生物学テキスト

廣明 秀一

構造生物学3(NMR による構造計算と構造評価)

### MOLMOL "MOLecule analysis and MOLecule display" Kurt Wütrich's Laboratory, ETH Switzerland & Bruker Spectrospin AG.

### はじめに

MOLMOL は生体高分子の三次元構造の表示・解析・処理を行うプログラム(分子構造 ビュワー)である. 横浜市立大学大学院・生体超分子科学専攻の大学院実習では RasMol, SwissPDBViewer, MolScript などの分子構造ビュワーの利用法を学んできたが, NMR 実 習では MOLMOL を使用する. それは, MOLMOL を開発した研究室が NMR による蛋白 質立体構造決定に対して先駆け的研究を行ってきた ETH の Wuthrich 研であり, とくに NMR 立体構造の表示については特別に使いやすい機能が整備されているからである.

### **MOLMOL**の機能は

- 1. PDB ファイルを読み込み表示可能.
- 2. CYANA などの構造計算の COR 形式のファイルを読み込み表示が可能.
- 3. NMR 構造計算で得られた「同一の分子の複数の立体構造」(=構造アンサンブル)を 取り扱って表示可能. 特に重ねがきをおこなったり, 比較する領域を変化させながら構 造の差異(RMSD)を計算したりすることが可能.

- 4. CYANA などの構造計算の制限距離情報を読み込んで分子上に表示させることができる.
- 5. Ramachandran プロットを作成できる.
- 6. 分子表面を計算して表示できる.
- 7. 静電ポテンシャルを計算して表示できる.
- 8. 例えば二本の helix の相対角度を計算することが可能.
- 9. 多くの操作をMACROとして記述して保存が可能.たとえば複数の分子に同じような配 色で絵を作成したいときなどに, クリック操作を繰り返さなくて良いので便利.
- 10. Win/Mac/Linux などで動作する

### 欠点としては

- 11. 電子密度マップを書かせることができない.
- 12. 結晶中の分子の対称操作などは行うことができない.
- 13. 半透明な分子や影の処理などにはバグがあったりする.

#### MOLMOL の起動

Linux 版の場合コマンドラインから [hiroaki@pc101] molmol er2\_11.pdb [return]

er2\_11.pdb を表示する.

プログラムの状態によって主鎖だけを表示したり、側鎖もコミで表示したりすることがある が「とりあえず主鎖だけ表示」するためのボタン操作の流れを説明すると 1. 全て消す [all]→[invisible]

#### 2. 主鎖を選んで線画表示



### MOLMOL のウインドウの説明

Main Window: 分子を表示するエリアの上部にメニューバー,右にボタンがならんでいる.ボタンはよく使う内容が5グループにわけて並んでいて,上からズーム系,分子原子選択系,表示(スタイル)系,表示(色・大きさ)系,表示(ラベル)となっている.画面下側に

はコマンドライン入力行とステイタス表示行(窓)がある. 分子をマウスでクリックすると何をクリ ックしたのかが表示されるのはここである.

分子表示エリア内部の分子をマウスでクリックして, 移動・回転・ズームを行うことができる.

マウス左→回転

マウス中央→平行移動

マウス右→メニュー

マウス左+中→ズームイン・アウト

### その他のウィンドウ

180
Rotate X
131
Rotate Y
278
Rotate Z
10.0
Clip Position
18.0
Clip Size
0.0
Clip Surface

メニューバー→Options→(最下段)User interfaces のチェックボックスをクリックすることで更に2つのウィンドウを開かせることができる.

<u>Valuator box</u>:分子の回転を行う.

Log Window: これまでのコマンドのログが記録される. 自作のマクロを創るときも個々を参考にすれば良い.

また,画面右側の右側のボタンのうち,Selection (原子の選択を行うダイアログ),Mol(表示 する分子を選択決定するダイアログ),Style(選択中の原子やボンドの表示属性を決定する ダイアログ),Color(色を決定するダイアログ)のボタンで,対応するダイアログがそれぞれひ らく.

### MOLMOL の使い方のミソ

**MOLMOL**の使い方は基本 的には上記のウィンドウやボタン で操作を行ったり、メニューバー からコマンドを選択することで行 う. またカーソルをコマンドライン にもっていって, キーボードでコ



マンドを入力することでも操作可能である(コマンド補完機 能が備わっているので、最初の頭文字だけ覚えていれば 操作可能である).

MOLMOL の操作で初心者がとっつきにくいのは

1. primitives の概念 と

2. 原子の選択のしかた・文法 であろう.

Primitives とは MOLMOL が作画して取り扱っている 描画オブジェクトのことで、 ヘリックスの板状矢印やコイル、 また MOLMOL で計算させた分子表面がそれに相当する. たとえばリボン図を描かせたとして、SelectAtom で '' (シングルコーテーション2回, MOLMOL では空文字を入 れると「全て」を意味する)として「Style]「invisible]とクリックし てもリボン図は消えない.これはリボン図のリボン表面は Atom / Bond とはべつの Primitive という属性でそれぞれ 記述されているからである。

SelectPrim '' [retutn] [invisible] とやると消すことができる.

原子の選択のしかたにも癖があるので要注意である. 詳細は MOLMOL のヘルプやオンラインマニュアル,また

Property
🔷 sel 💠 disp 💠 move
1 1e32001
2 1e32002 3 1e32003
Help



は日本語の使い方のページの 紹介に譲るとして、ここでは簡単 なルールを書いておく.

(1)コマンドラインから入力 するとき→コマンドの引数はかな らずシングルコーテーションで挟 tp

### 例:SelectAtom 'heavy'

(2)コマンドラインから入力する ときの値は数字の場合にはその まま、文字列の場合にはダブル コーテーションで囲む

例:SelectRes 'num=20..40' (残基 20~40 を選ぶ) SelectRes 'name="LYS+" (残基リジンを選ぶ) なお、GLUとGLU-、LYSと LYS+を別々に取り扱うなど、か なり融通が利かないつくりなので 注意.

(3) Selection Dialog から同じ情 報を入力する場合にはシングル コーテーションは不要(これもま た混乱を招く原因)

Atom	Bond	Dist
invisible	invisible	invisible
sphere	line	line
tetrahedron	half_line	viol
	cylinder	cylinder
	half_cylinder	neon
	neon	cone
	half_neon	
	cone	
	half_cone	
Close	[	Help

Mol	Ĭ	Å.
Res	Ĭ	÷.
Atom	Ĭ	÷.
Bond	Ĭ	Å.
Angle	Ĭ	<b>Å</b>
+A+B+A	Ĭ	<b>≜</b>
Dist	Ĭ	<b>≜</b>
Prim	Y	×.

(4) ただし SelectAtom 文を上手につかうとかなり高度な選択ができる.

例:SelectAtom 'res.name="ARG+" & name="CA"

以上のように MOLMOL では内部でとりあつかっている分子・残基・原子・結合・結合角 にそれぞれ属性を値をふりわけており、それを適切に選択し、そこに適切な値をいれていく ことで色や大きさを変えることができるようになっていく. 以下に MOLMOLのマニュアルから 抜粋したいくつかの属性値や値の表を載せておく.

item	value	type	explanation
mol	num	integer	molecule number
mol	number	integer	molecule number
res	num	integer	residue number
res	number	integer	residue number
prim	num	integer	primitive number
prim	number	integer	primitive number
mol	name	string	molecule name
res	name	string	residue name
atom	name	string	atom name
angle	name	string	angle name
atom	shift	float	chemical shift of atom
atom	bfactor	float	B factor of atom
atom	vdw	float	van der Waals radius of atom

atom	charge	float	partial charge of atom
atom	heavychar ge	float	charges on heavy atoms
atom	avgcharge	float	averaged charges on heavy atoms
atom	simplechar ge	float	simple charges from setup file
atom	d	float	distance from reference atom(s)
bond	len	float	bond length
angle	val	float	angle
dist	val	float	distance
dist	limit	float	limit of constraint
dist	viol	float	violation of constraint
dist	upl	bool	true if distance is upper limit
dist	lol	bool	true if distance is lower limit
dist	hbond	bool	true if distance is H-bond
atom	attr	integer	graphics attribute index
bond	attr	integer	graphics attribute index
dist	attr	integer	graphics attribute index
prim	attr	integer	graphics attribute index

item	name	description
any	all	Always set for all items. Do not modify!
any	selected	Set for selected items. Most commands operate on items that have this property set.
any	displaye d	Only items with this property set are displayed. Can be useful for making items (especially molecules) temporarily visible/invisible, use the <u>Molecule Dialog</u> for a convenient way of setting it.
mol	movable	Only molecules with this property set are affected by <u>interactive manipulations</u> and commands that transform molecules. Useful for moving molecules relative to each other, use the <u>Molecule Dialog</u> for a convenient way of setting it.
ato m	visible	Set for all atoms that have a display style that makes them visible. Convenient to restrict a selection to only visible items.
bon d	visible	Set for all bonds that have a display style that makes them visible.
dist	visible	Set for all distances that have a display style that makes them visible.
prim	visible	Set for all primitives that have a display style that makes them visible.

item	name	description
atom	bb	Backbone atoms of a protein or nucleic acid.
bond	bb	Backbone bonds of a protein or nucleic acid.
atom	sc	Side chain atoms of a protein or nucleic acid.
bond s	sc	Side chain bonds of a protein or nucleic acid.
atom	heavy	Heavy atoms.

bond	heavy	Bonds between two heavy atoms.
atom	heavysc	Heavy side chain atoms of a protein or nucleic acid.
bond	heavysc	Bonds between two heavy side chain atoms of a protein or nucleic acid.
atom	phos	Atoms in phosphate group of a nucleic acid.
bond	phos	Bonds in phosphate group of a nucleic acid.
atom	sugar	Atoms in sugar group of a nucleic acid.
bond	sugar	Bonds in sugar group of a nucleic acid.
atom	base	Atoms in base of a nucleic acid.
bond	base	Bonds in base of a nucleic acid.
atom	proton	Hydrogen atoms.
atom	са	Atoms with name CA.
atom	pseudo	Pseudo atoms (name starting with Q).
atom	lonepair	Lone pair (name starting with LP).

### 文法としては

### Item.name = name

### Item.name = value

のように使い,集合に対しては&(または小文字で and 論理 seki), |(または小文字 or論理和), |(または小文字 or not, 否定)などを作用させることができる.