

## 一般的な化合物の Library ファイル (REFMAC 用) の作り方

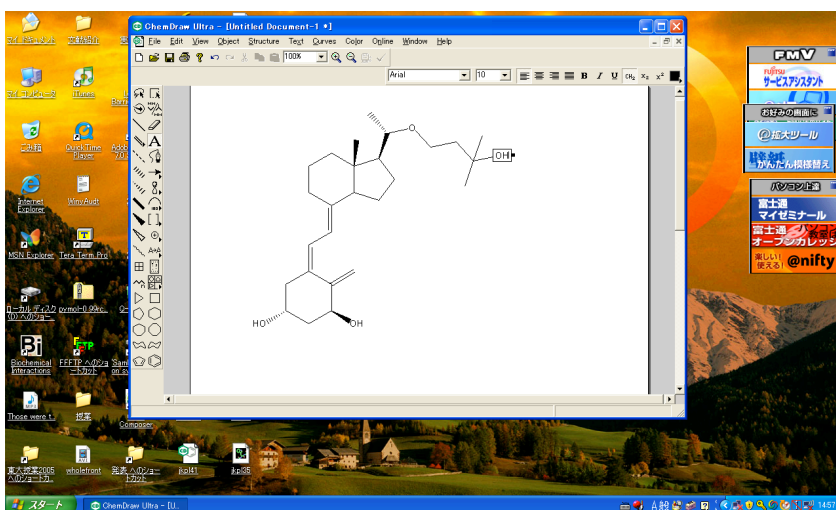
2009/11/16 清水敏之

### 1. はじめに

タンパク質の合成リガンドなど一般的な化合物が入った結晶解析を行うときは、その化合物の Library ファイル (化合物の組成、原子間距離などの情報が入った情報ファイル) を作成しなければならない。ここでは、作り方を簡単に説明する。

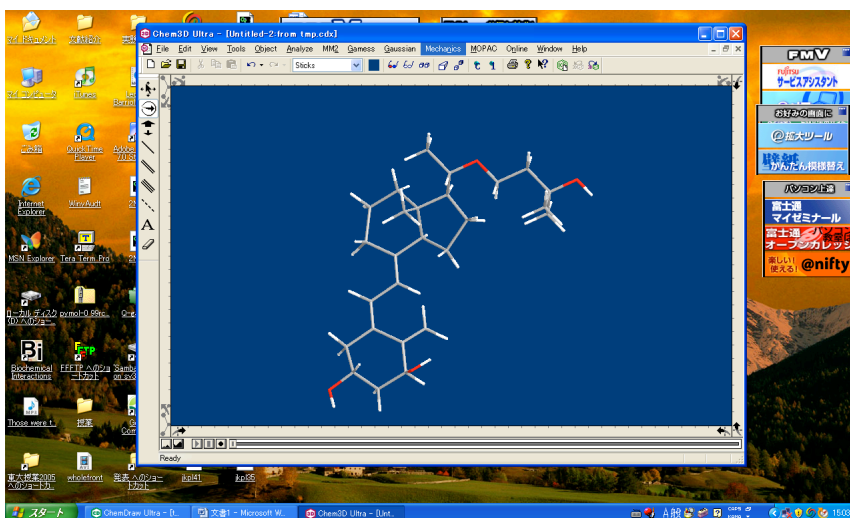
### 2. ChemDraw による化合物の構造式の作成

ChemDraw によって構造式を作成する。Chirality などに注意。作り終えたら ChemDraw のファイルの形で save (拡張子 .cdx)。



### 3. Chem3D による 3 次元座標の発生

ChemDraw で作成したファイルを Chem3D に読み込みます (File->Open でファイルを指定)。Chem3D が自動的に 3 次元座標を発生する。この座標を PDB 形式で save (Save as で PDB 形式を選択して保存)。









をアサインする。

コメント

**Chem3D** では水素を発生させてしまうので、**editor** など水素を取り除いてもよい。  
**sketcher** ではほぼ同様の作業ができる。