

intDesc-LP ver1.1

ユーザーマニュアル

理化学研究所
計算科学研究センター
HPC/AI 駆動型医薬プラットフォーム部門
2023 年 11 月 03 日

目次

1. intDesc-LP_ver1.1 パッケージ概要	3
1.1 intDesc-LP で扱われている相互作用の定義	3
2. 実行方法	4
3. 実行例 (L_IT009)	7
3.1 実行コマンド	7
3.2	7
3.2.1 Mol2 ファイル (IT009_3aox_ALK_moe_addH_minH_gasteiger_mod.mol2)	7
3.2.2 相互作用対象分子指定ファイル (mol_select.yaml)	7
3.2.3 Van Der Waals 半径定義ファイル (vdw_radius.yaml)	8
3.2.4 相互作用閾値設定ファイル (param.yaml)	8
3.2.5 相互作用優先順位指定ファイル (priority.yaml)	9
3.3 出力ファイル	9
3.3.1 Raw list ファイル (L_IT009_raw_list.txt)	9
3.3.2 Interaction Count list ファイル (L_IT009_interaction_count_list.csv)	10
3.3.3 One-hot list ファイル (L_IT009_one_hot_list.csv)	10
3.3.4 Interaction Sum list ファイル (L_IT009_interaction_sum_list.csv)	10
3.3.5 pml ファイル (L_IT009.pml)	10
4. 入力ファイル	13
4.1 構造ファイル	13
4.2 相互作用対象分子指定ファイル	14
4.3 Van Der Waals 半径定義ファイル	17
4.4 相互作用閾値設定ファイル	17
4.5 相互作用優先順位指定ファイル	19
4.6 水分子定義ファイル	19
5. 出力ファイル	20
5.1 Raw list ファイル	20
5.2 Interaction Count list ファイル	24
5.3 One-hot list ファイル	25
5.4 Interaction Sum list ファイル	26
5.5 pml ファイル	28
6. 相互作用一覧	30

1. intDesc-LP_ver1.1 パッケージ概要

intDesc-LP プログラムアーカイブ(intDesc-LP_ver1.1.zip)には以下のファイルが含まれる。

```
<intDesc-LP_ver1.1>
├─ <install_test> (インストールマニュアル参照：2.3章)
│   ├── run_test.sh
│   └── data.zip
├─ <sample>
│   ├── 3aox_prep0.mol2 (本マニュアル参照：4.1章)
│   ├── ligand_select.yaml (本マニュアル参照：4.2章)
│   ├── vdw_radius.yaml (本マニュアル参照：4.3章)
│   ├── param.yaml (本マニュアル参照：4.4章)
│   └── priority.yaml (本マニュアル参照：4.5章)
├─ interaction.py (サブスクリプト)*
├─ interaction_descriptor.py (メインスクリプト)*
├─ mol2.py (サブスクリプト)*
├─ my_math.py (サブスクリプト)*
├─ group.yaml** (システムファイル)*
├─ water_definition.txt (本マニュアル参照：4.6章)
└─ requirements.txt (インストールマニュアル参照：2.1章)
```

*ユーザーによる編集を行わないファイルである。

**group.yaml は各相互作用とそのグループを一覧化したシステムファイルである。主にファイル出力時に参照されるもので、特にグループ名は「Interaction Sum list ファイル」のグループ名を表す。

1.1 intDesc-LP で扱われている相互作用の定義

現在投稿中の以下の論文のサブリメントを参照のこと。

Ohta, M. et al., “intDesc: Software for comprehensive and precise identification, visualization, and enumeration of ligand-protein interactions” (Submitted)

2. 実行方法

```
$ python interaction_descriptor.py [機能名] ¥  
    [mol2ファイル] ¥  
    [相互作用対象分子指定ファイル] ¥  
    [van der waals 半径定義ファイル] ¥  
    [相互作用閾値設定ファイル] ¥  
    [相互作用優先順位指定ファイル] ¥  
    [出力ファイル名] ¥  
    (--allow_mediate_position 数値) ¥  
    (--on_14) ¥  
    (--dup) ¥  
    (--no_mediate) ¥  
    (--no_out_total) ¥  
    (--no_out_pml)
```

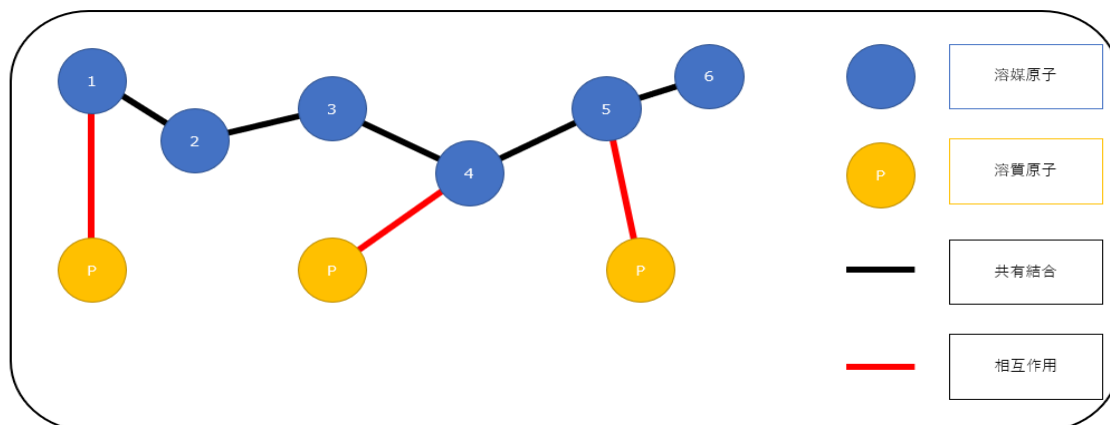
位置引数	説明
機能名	実行機能を指定する 現在は、蛋白質ーリガンド相互作用の計算を実行するための" ligand "のみ指定可能
mol2 ファイル	3.2.1 章を参照。
相互作用対象分子指定ファイル	3.2.3 章を参照。
van der waals 半径定義ファイル	3.2.4 章を参照。
相互作用閾値設定ファイル	3.2.5 章を参照。
相互作用優先順位指定ファイル	3.2.6 章を参照。
出力ファイル名	出力ファイルの prefix（拡張子を除いた文字列）。 (例：output)

【オプション：--allow_mediate_position 数値】

溶媒を介する相互作用の出力を制限する場合は、このオプションを指定する。溶媒を介する相互作用に対して、溶媒原子間の位置関係が指定よりも遠いものは出力が制限される。

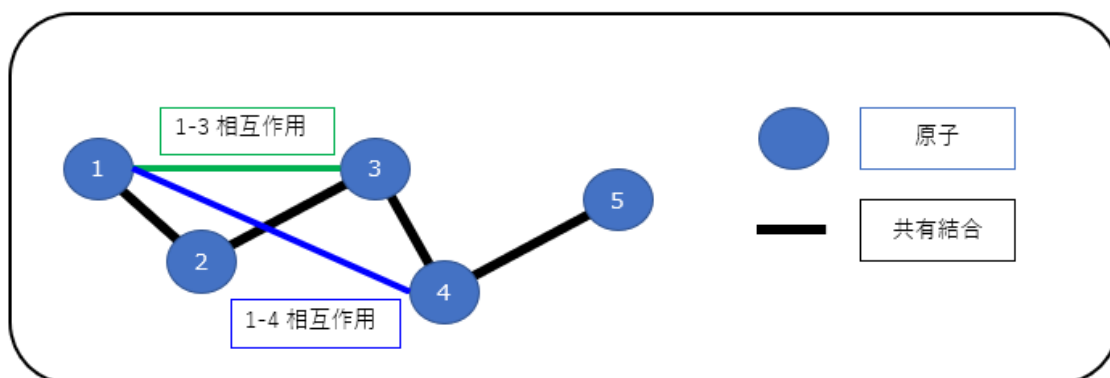
例：「--allow_mediate_pos 4」と指定した場合

溶媒を介する相互作用として「溶質 P vs 溶媒 1-溶媒 4 vs 溶質 P」は検出されるが、「溶質 P vs 溶媒 1-溶媒 5 vs 溶質 P」は検出されない。



【オプション：--on_14】

1-3, 1-4 相互作用を検出したい場合は、このオプションを指定する。下図のように共有結合で繋がる原子間で検出される相互作用のうち、1~2 個の原子を介して隣接する原子間で検出される相互作用が検出される。



【オプション：--dup】

同一重原子間に、重複して相互作用を検出する場合は、このオプションを指定する。

【オプション：--no_mediate】

「溶媒を介する相互作用」を検出しない場合は、このオプションを指定する。

【オプション：-- no_out_total】

「Interaction Count list ファイル」を出力しない場合は、このオプションを指定する。

【オプション：-- no_out_pml】

「pml ファイル」を出力しない場合は、このオプションを指定する。

3. 実行例 (L_IT009)

3.1 実行コマンド

```
$ python interaction_descriptor.py ligand ¥
    IT009_3aox_ALK_moe_addH_minH_gasteiger_mod.mol2 ¥ (mol2ファイル)
    mol_select.yaml ¥ (相互作用対象分子指定ファイル)
    vdw_radius.yaml ¥ (Van Der Waals 半径定義ファイル)
    param.yaml ¥ (相互作用閾値設定ファイル)
    priority.yaml ¥ (相互作用優先順位指定ファイル)
    L_IT009 (出力ファイルのprefix)
```

3.2

3.2.1 Mol2 ファイル (IT009_3aox_ALK_moe_addH_minH_gasteiger_mod.mol2)

4.1 章参照

```
@<TRIPOS>MOLECULE
3AOX.A
5520 5340 539 0 0
BIOPOLYMER
USER_CHARGES

@<TRIPOS>ATOM
1 N -16.8940 35.4790 -2.3240 N.3 1 SER1086 -0.3180 BACKBONE
2 H1 -16.6844 35.8513 -3.2575 H 1 SER1086 0.1190 BACKBONE
3 H2 -17.2581 36.2855 -1.8256 H 1 SER1086 0.1190 BACKBONE
4 CA -15.5750 35.1060 -1.7420 C.3 1 SER1086 0.1077 BACKBONE
5 HA -15.6920 34.9911 -0.6637 H 1 SER1086 0.0579 BACKBONE

@<TRIPOS>BOND.
1 1 2 1 BACKBONE.
2 1 3 1 BACKBONE.
3 1 4 1 BACKBONE.
4 4 5 1 BACKBONE.
5 4 6 1 BACKBONE.

@<TRIPOS>SUBSTRUCTURE.
1 SER1086 4 RESIDUE 4 A SER 1.
2 THR1087 15 RESIDUE 4 A THR 2.
3 ILE1088 29 RESIDUE 4 A ILE 2.
4 MET1089 48 RESIDUE 4 A MET 2.
5 THR1090 65 RESIDUE 4 A THR 2.
```

3.2.2 相互作用対象分子指定ファイル (mol_select.yaml)

4.2 章参照

```
ligand:
  name: EMH
solvent_1:
  name: HOH
  chain: A
protein:
  chain: A
```

3.2.3 Van Der Waals 半径定義ファイル (vdw_radius.yaml)

4.3 章参照

計算を行う際には、intDesc-LP_ver1.1/sample/vdw_radius.yaml を使用すること。

```
# Van Der Waals radius definition file
# Version for the second half of FY2022
#
# Van Der Waals Radius of the elements
# # FORMAT RULE
# # - [Element symbol]:[Van der Waals radius]
# # - Enter [Van der Waals radius] in "Å".
H: 1.2
C: 1.7
N: 1.55
O: 1.52
F: 1.47
S: 1.8
Cl: 1.75
Br: 1.85
I: 1.98
Fe: 2.44
Zn: 2.39
Ca: 2.62
Mg: 2.51
Ni: 2.40
P: 1.80
Na: 2.27
K: 2.75
```

3.2.4 相互作用閾値設定ファイル (param.yaml)

4.4 章参照

計算を行う際には、intDesc-LP_ver1.1/sample/param.yaml を使用すること。

```
# Interaction threshold setting file
# Version for the second half of FY2022
# interaction_type dist(Ang) angle1(deg) angle2_min(deg) angle2_max(deg)
HB_OH_(N,O): 3.2 60.0 60.0 180.0

# interaction_type dist(Ang) angle1(deg) angle2(deg) angle3(deg)
HB_OH_OH: 3.2 60.0 90.0 60.0

# interaction_type dist(Ang) angle1(deg) angle1_N4(deg) angle2_min(deg)
# angle2_max(deg)
HB_NH_(N,O): 3.2 60.0 90.0 60.0 180.0

# interaction_type dist(Ang) angle1(deg) angle1_N4(deg) angle2(deg)
# angle3(deg)
HB_NH_OH: 3.2 60.0 90.0 90.0 60.0

# interaction_type dist(Ang)
```


(Met)_(X): 0.2

3.2.5 相互作用優先順位指定ファイル (priority.yaml)

4.5 章参照

計算を行う際には、intDesc-LP_ver1.1/sample/priority.yaml を使用すること。

```
# Interaction priority specification file
# Version for the second half of FY2022
# Label: Score
OMulPol: 3

CH_PI: 4
CH_N: 2
C_N_vdw: 0
CH_O: 2
C_O_vdw: 0
CH_S: 2
C_S_vdw: 0

S_PI: 4
S_N: 2
S_N_vdW: 0
S_O: 2
S_O_vdW: 0
S_S: 2
SH_S: 1
S_S_vdW: 0
*****
```

3.3 出力ファイル

出力ファイルはすべて、prefix (L_IT009)で始まるファイルである。

3.3.1 Raw list ファイル (L_IT009_raw_list.txt)

5.1 章参照

```
R data/L_IT009/IT009_3aox_ALK_moe_addH_minH_gasteiger_mod.mol2
L EMH
S1 HOH

K L-Pro
I1-2 CH_N 4.1389 4.8789 3.0775 4.4810 5.4621 109.8123 164.7869
LC1 EMH 901 N25 4748 N.p13
LN1 EMH 901 C29 4749 C.3 1
LN1 EMH 901 C30 4755 C.3 1
LN1 EMH 901 C10 4709 C.ar 1
PC2 LEU 1122 CD2 584 C.3
PN2 LEU 1122 HD21 585 H 1
*****
```

3.3.2 Interaction Count list ファイル (L_IT009_interaction_count_list.csv)

5.2 章参照

```
L#CH_F#Pro,0
L#CH_F#S1,0
L#CH_F#S1#CH_F#Pro,0
L#CH_F#S1#CH_Hal_Br#Pro,0
L#CH_F#S1#CH_Hal_Cl#Pro,0
L#CH_F#S1#CH_Hal_I#Pro,0
L#CH_F#S1#CH_N#Pro,0
L#CH_F#S1#CH_O#Pro,0
L#CH_F#S1#CH_PI#Pro,0
L#CH_F#S1#CH_S#Pro,0
L#CH_F#S1#Ca_X#Pro,0
L#CH_F#S1#Cl_X#Pro,0
L#CH_F#S1#Dipo#Pro,0
L#CH_F#S1#Elec_NH_N#Pro,0
L#CH_F#S1#Elec_NH_O#Pro,0
L#CH_F#S1#Elec_OH_N#Pro,0
L#CH_F#S1#Elec_OH_O#Pro,0
*****
```

3.3.3 One-hot list ファイル (L_IT009_one_hot_list.csv)

5.3 章参照

```
LP_HB_NH_O,LP_Elec_NH_N,LP_CH_O,LP_CH_N,LP_CH_PI,LP_Dipo,LP_vdW,LS1_Elec_OH_N,LS1_CH_O,LS1_vdW,S1P_HB_OH_O,S1P_HB_NH_O,S1P_Elec_NH_O,S1P_CH_O,S1P_vdW,dist,interaction_label,molecular_type,chain,residue,residue_number,atom_name,atom_number,atom_type,partner_molecular_type,partner_chain,partner_residue,partner_residue_number,partner_atom_name,partner_atom_number,partner_atom_type
0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,3.8550,CH_PI,ligand,A,EMH,901,C2,4737,C.ar,protein,A,LEU,1256,CD1,2518,C.3
0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,3.8550,CH_PI,ligand,A,EMH,901,N9,4737,N.pl3,protein,A,LEU,1256,CD2,2522,C.3
0,0,0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,3.8959,vdW,ligand,A,EMH,901,N9,4737,N.pl3,protein,A,EDO,802,C1,4783,C.3
*****
```

3.3.4 Interaction Sum list ファイル (L_IT009_interaction_sum_list.csv)

5.4 章参照

```
0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,3.8550,CH_PI,ligand,A,EMH,901,N9,4737,N.pl3,protein,A,LEU,1256,CD2,2522,C.3
0,0,0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,3.8959,vdW,ligand,A,EMH,901,N9,4737,N.pl3,protein,A,EDO,802,C1,4783,C.3
1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,2.7433,HB_NH_O,ligand,A,EMH,901,N9,4737,N.pl3,protein,A,EDO,802,02,4791,0.3
0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,4.1059,CH_PI,ligand,A,EMH,901,C14,4739,C.ar,protein,A,LEU,1122,CD1,580,C.3
0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,4.2350,CH_PI,ligand,A,EMH,901,C14,4739,C.ar,protein,A,GLY,1202,CA,1656,C.3
0,0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,3.6976,Dipo,ligand,A,EMH,901,C16,4740,C.2,protein,A,MET,1199,0,1625,0.2
0,0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,3.6976,Dipo,ligand,A,EMH,901,020,4741,0.2,protein,A,MET,1199,C,1624,C.2
0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,3.6112,CH_O,ligand,A,EMH,901,020,4741,0.2,protein,A,ALA,1148,CB,797,C.3
*****
```

3.3.5 pml ファイル (L_IT009.pml)

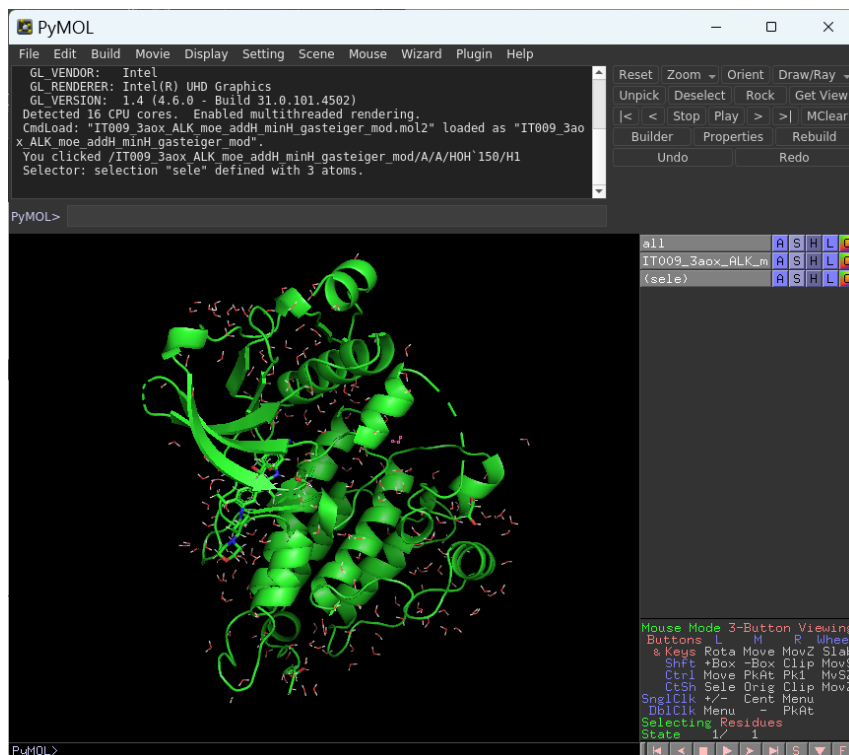
5.5 章参照

分子グラフィックスプログラム PyMOL を用により、intDesc-LP で検出した相互作用を表示するためのファイルである。Pml ファイルにより相互作用を表示する方法を以下に示す。

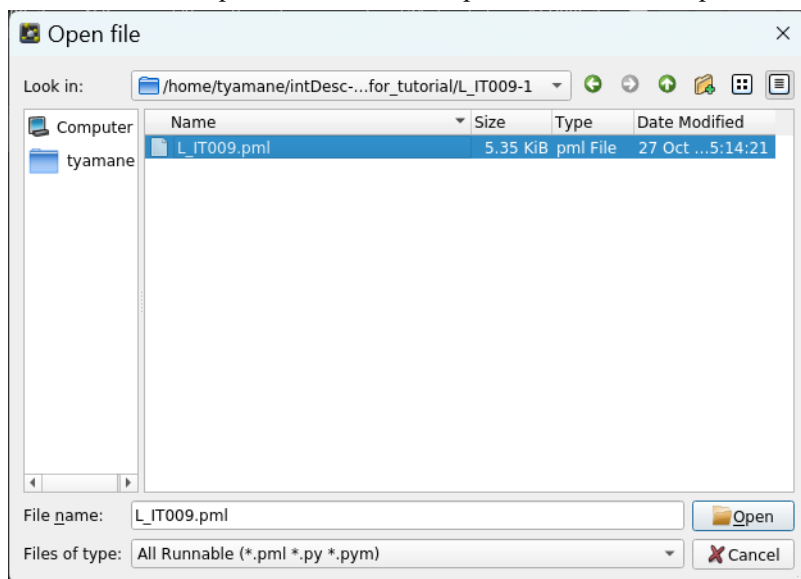
3.3.5.1 PyMOL による可視化

出力された pml ファイル (L_IT009.pml) を用いて、可視化を行う。(5.5 章参照)

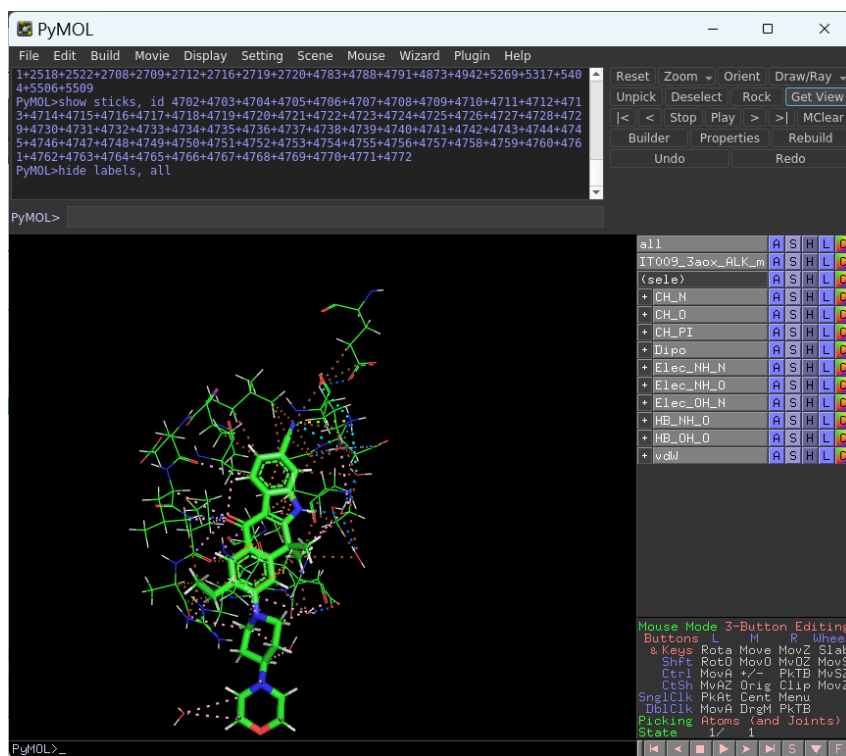
1. mol2 ファイル (IT009_3aox_ALK_moe_addH_minH_gasteiger_mod.mol2) を PyMOL にて表示



2. File > RunScript より、"L_IT009.pml"を選択し、"Open"をクリック



3. 解析対象の相互作用記述子が表示される。



4. 入力ファイル

4.1 構造ファイル

構造ファイルとして Mol2 形式(参考:<https://zhanggroup.org//DockRMSD/mol2.pdf>)のファイルを読み込む。

本プログラムでは、ファイル中の下記セクションを参照する。

セクション	必須	備考
ATOM	○	—
BOND	○	—
SUBSTRUCTURE	—	分子構造定義時 (0 章) に Chain ID を使用する場合は、本セクションの情報が必要。

4.2 相互作用対象分子指定ファイル

計算対象となる分子構造を定義するファイル（.yaml）。

本プログラムでは、分子構造の自動検出を行っていないため、タンパク質、リガンド、溶媒等、構造ファイル中の分子構造を明示的に指定する必要がある。

```
# 書式)
[分子タイプ名]:
  [項目]: [値]
```

```
# 記載例)
solvent:
  name: HOH
ligand:
  name: EMH
protein:
  chain: A
```

分子タイプ名※1	対象分子
protein_[N]	タンパク質
ligand_[N]	リガンド
solvent_[N]	溶媒

※1 分子タイプ名は、番号別に複数記載することが可能。

- ・ 番号無し：protein
- ・ 番号有り：protein_[N] (N=1,2,...n)

項目	対象	必須	備考
num	残基番号	○	name と同時に指定できない。
name	残基名	○	num と同時に指定できない。
chain	Chain ID		複数指定する場合、num, name の指定はできない。
type	主鎖 / 側鎖		主鎖：「C, N, CA, O, H, HA」である原子 側鎖：「C, N, CA, O, H, HA」以外の原子

各項目の書式は以下の通り。

項目	書式	想定例	記載例
残基番号	num: A	残基番号 100 を指定	num: 100
残基番号(複数)	num: [A, B]	残基番号 100, 101 を指定	num: [100, 101]
残基番号(範囲)	num: A:B	残基番号 100 から 110 を指定	num: 100:110
残基名	name: A	残基名 Gly を指定	name: GLY
残基名(複数)	name: [A, B]	残基名 Gly, Arg を指定	name: [GLY, ARG]
Chain ID	chain: A	Chain H を指定	chain: H
Chain ID(複数)	chain: [A, B]	Chain H, L を指定	chain: [H, L]
主鎖	type: main	-	-
側鎖	type: side	-	-

【記載例：複数鎖を指定する場合】

	項目			
対象分子	残基名	残基番号	Chain	主鎖/側鎖
タンパク質			A, B	
リガンド	EMH			
溶媒	HOH		A	

```
solvent:
  name: HOH
  chain: A
ligand:
  name: EMH
protein:
  chain: [A, B]
```

【記載例：複数のリガンドを定義】

	項目			
対象分子	残基名	残基番号	Chain	主鎖/側鎖
タンパク質			A	
リガンド	XXX, YYY			
溶媒	HOH			

```
solvent:
  name: HOH
ligand:
  name: [XXX, YYY]
protein:
  chain: [A, B]
```

【記載例（mutant）：抗体変異アミノ酸を複数定義】

対象分子	項目			
	残基名	残基番号	Chain	主鎖/側鎖
抗体変異アミノ酸		20	H	side※1
抗体			H, L	
抗原			A	
溶媒	HOH			

※1 残基番号 20 の主鎖原子には「抗体」の指定が適用される。

（抗体で Chain L を指定している為）

```

solvent:
  name: HOH
mutant:
  chain: H
  num: 20
  type: side
antibody:
  chain: [H, L]
antigen:
  chain: A

```


4.3 Van Der Waals 半径定義ファイル

van der waals 半径を設定するファイル(.yaml)。

```
# 書式)
[元素記号]: [van der waals半径 (Å) ]

# 記載例)
H: 1.2
C: 1.7
N: 1.55
O: 1.52
...
```

対象原子: 「H, C, N, O, F, S, Cl, Br, I, Fe, Zn, Ca, Mg, Ni, P, Na, K」

4.4 相互作用閾値設定ファイル

相互作用判定に使用する閾値を設定するファイル (.yaml)。

```
# 書式)
[相互作用ラベル]: [閾値]

# 記載例)
...
CH_F: 1.0 3.05 180.0 137.15
NH_F: 1.0 2.99 180.0 145
SH_F: 1.0 3.3 180.0 145
...
```

【相互作用閾値テーブル定義】：相互作用定義は別紙参照

相互作用指定文字列	相互作用名	閾値						
HB_NH_(N,O)	水素結合1	dist	angle1	angle1_N4	angle2_min	angle2_max	—	—
HB_NH_OH	水素結合1	dist	angle1	angle1_N4	angle2	angle3	—	—
HB_OH_(N,O)	水素結合2	dist	angle1	angle2_min	angle2_max	—	—	—
HB_OH_OH	水素結合2	dist	angle1	angle2	angle3	—	—	—
CH_N	CH_N 相互作用	buffer	dist1	dist2	angle1	angle2	—	—
CH_O	CH_O 相互作用	buffer	dist1	angle1	—	—	—	—
SH_N	SH_N 相互作用	buffer	angle1	—	—	—	—	—
SH_O	SH_O 相互作用	buffer	angle1	—	—	—	—	—
Elec_(NH,OH)_(N,O)	静電相互作用	dist	buffer	angle1	angle1_N4	angle2_min	angle2_max	—
Elec_(N, O)H_OH	静電相互作用	dist	buffer	angle1	angle1_N4	angle2	angle3	—
vdW	van_der_waals相互作用	buffer	diff	dist1	dist2	dist3	—	—
PI_PI	n-n stacking相互作用	buffer	angle1	angle1	—	—	—	—
Dipo	双極子-双極子相互作用	buffer	angle1	angle2	angle3	charge	hydro	—
OMulPol	直交多極子相互作用	buffer	angle1_min	angle1_max	angle2	angle3	charge	—
CH_PI	CH-n相互作用	buffer	coef	dist1	dist2	angle1	angle2	—
NH_PI	NH-n相互作用	buffer	coef	dist1	dist2	angle1	angle2	—
OH_PI	OH-n相互作用	buffer	coef	dist1	dist2	angle1	angle2	—
SH_PI	SH-n相互作用	buffer	coef	dist1	dist2	angle1	angle2	—
Hal_(X)_N	ハロゲン相互作用 I	buffer	angle	—	—	—	—	—
Hal_(X)_O	ハロゲン相互作用 I	buffer	angle	—	—	—	—	—
Hal_(X)_S	ハロゲン相互作用 I	buffer	angle	—	—	—	—	—
CH_F	CH-F相互作用	buffer	dist1	angle1	angle2	—	—	—
NH_F	NH-F相互作用	buffer	dist1	angle1	angle2	—	—	—
OH_F	OH-F相互作用	buffer	dist1	angle1	angle2	dist2	—	—
SH_F	SH-F相互作用	buffer	dist1	angle1	angle2	—	—	—
CH_Hal_(X)	CH-Hal 相互作用	buffer	angle1	angle2	angle3	angle4	—	—
NH_Hal_(X)	NH-Hal 相互作用	buffer	angle1	angle2	angle3	angle4	—	—
OH_Hal_(X)	OH-Hal 相互作用	buffer	angle1	angle2	angle3	angle4	—	—
SH_Hal_(X)	SH-Hal 相互作用	buffer	angle1	angle2	angle3	angle4	—	—
Hal_PI_(X)	Halogen-n 相互作用	buffer	coef	angle1	dihedral	—	—	—
CH_S	CH-S相互作用	buffer	dist1	dist2	angle1	angle2	—	—
OH_S	OH-S相互作用	buffer	angle1	—	—	—	—	—
SH_S	SH-S相互作用	buffer	angle1	—	—	—	—	—
NH_S	NH-S相互作用	buffer	dist1	dist2	angle1_min	angle1_max	angle2_min	angle2_max
S_O	S-O相互作用	buffer	—	—	—	—	—	—
S_N	S-N相互作用	buffer	—	—	—	—	—	—
S_PI	S-n相互作用	buffer	coef	angle1	angle2	dihedral	—	—
S_S	S-S相互作用	buffer	angle1	—	—	—	—	—
S_F	S-F相互作用	buffer	angle1	—	—	—	—	—
(Met)_(X)	金属と重原子との間の相互作用	dist	—	—	—	—	—	—
(Ion)_(X)	イオンと重原子との間の相互作用	buffer	—	—	—	—	—	—

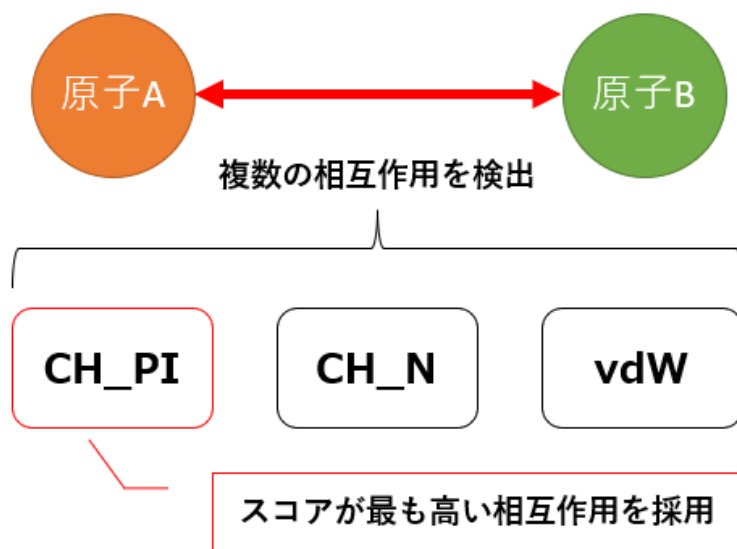
4.5 相互作用優先順位指定ファイル

相互作用の優先度を設定するファイル (.yaml)。

同一重原子間で複数の相互作用が判定された場合、本ファイルで設定された優先度のうち、スコアが最も高い相互作用が割り当てられる。

```
# 書式)
[相互作用ラベル]: [優先度]

# 記載例)
CH_PI: 3
CH_N: 2
C_N_vdw: 0
...
```



4.6 水分子定義ファイル

水分子名を定義するファイル (.txt)

- ・「#」で始まる行は、コメント行で認識
- ・各行に水分子名を定義する。

```
# Definition of water molecule name
# List the names recognized by Pymol
HOH
TIP
```

5. 出力ファイル

5.1 Raw list ファイル

検出された相互作用の詳細が出力されたファイル

```
output_raw_list.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
R .¥3aox_prep0.mol2 ... ① 入力構造ファイル名
L EMH ... ② 選択されたリガンド
S HOH ... ③ 選択された溶媒

K L-Pro
I1-2 CH_N 4.1389 4.8789 3.0769 4.4810 5.4621 109.8123 164.8236
LC1 EMH 901 N25 4767 N.pl3
LN1 EMH 901 C29 4768 C.3 1
LN1 EMH 901 C30 4770 C.3 1
LN1 EMH 901 C10 4746 C.ar 1
PC2 LEU 1122 CD2 581 C.3
PN2 LEU 1122 CG 579 C.3 1
PN2 LEU 1122 HD22 591 H 1
PN2 LEU 1122 HD21 590 H 1
PN2 LEU 1122 HD23 592 H 1

K L-Pro
I1-2 CH_0 3.5377 3.9295 2.6266 4.7151 95.6216 143.6507
LC1 EMH 901 C4 4741 C.ar
LN1 EMH 901 C6 4743 C.ar ar
LN1 EMH 901 C2 4759 C.ar ar
LN1 EMH 901 H4 4777 H 1
PC2 GLU 1197 O 1613 O.2
PN2 GLU 1197 C 1612 C.2 2
```

【④詳細セクション】

項 目 説明		書式	
K	検出された相互作用の原子ペアに応じたラベル	K [ラベル]	
	ラベル名 相互作用ペア		
	L-Pro		リガンド – タンパク質
	L-S[N]		リガンド – 溶媒
	L-S[N]-Pro		リガンド – 溶媒 – タンパク質
I1-2	1 番目と 2 番目の原子間で検出された相互作用の相互作用ラベル及び判定基準となった幾何学情報※1	I1-2 [相互作用ラベル] [距離・角度等]…	
I3-4	3 番目と 4 番目の原子間で検出された相互作用の相互作用ラベル及び判定基準となった幾何学情報	I3-4 [相互作用ラベル] [距離・角度等]…	
LC1	相互作用している 1 番目のリガンド原子	LC1 [残基名] [残基番号] [原子名] [原子番号] [atom_type]	
PC2	相互作用している 2 番目のタンパク質原子	PC2 [残基名] [残基番号] [原子名] [原子番号] [atom_type]	
SC2	相互作用している 2 番目の溶媒原子	SC2 [残基名] [残基番号] [原子名] [原子番号] [atom_type]	
SC3	相互作用している 3 番目の溶媒原子	SC3 [残基名] [残基番号] [原子名] [原子番号] [atom_type]	
PC4	相互作用している 4 番目のタンパク質原子	PC4 [残基名] [残基番号] [原子名] [原子番号] [atom_type]	
LN*	LC* と共有結合している原子	LN* [残基名] [残基番号] [原子名] [原子番号] [atom_type] [LC*との bond_type]	
PN*	PC* と共有結合している原子	PN* [残基名] [残基番号] [原子名] [原子番号] [atom_type] [PC*との bond_type]	
SN*	SC* と共有結合している原子	SN* [残基名] [残基番号] [原子名] [原子番号] [atom_type] [SC*との bond_type]	

※1 各相互作用で表示される情報は【I 行詳細】を参照

【I 行詳細】：相互作用定義は別紙参照

相互作用名	相互作用ラベル	項目1	項目2	項目3	項目4	項目5	項目6	項目7	項目8
水素結合1	HB_NH_N	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—	—
水素結合1	HB_NH_O	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—	—
水素結合1	HB_NH_O	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	—	—	—	—
水素結合2	HB_OH_N	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—	—
水素結合2	HB_OH_O	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—	—
水素結合2	HB_OH_O	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	—	—	—	—
CH_N 相互作用	CH_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	角度(θ2)	—
CH_N 相互作用	CH_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—
CH_O 相互作用	CH_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
CH_O 相互作用	CH_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	—	—	—
SH_N 相互作用	SH_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
SH_N 相互作用	SH_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	—	—	—
SH_O 相互作用	SH_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
SH_O 相互作用	SH_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	—	—	—
静電相互作用	Elec_NH_N	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—	—
静電相互作用	Elec_NH_O	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—	—
静電相互作用	Elec_NH_O	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	—	—	—	—
静電相互作用	Elec_OH_N	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—	—
静電相互作用	Elec_OH_O	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—	—
静電相互作用	Elec_OH_O	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	—	—	—	—
Van Der Waals 相互作用	vdW	距離(d1)	距離(dNearst)	距離(dIfVDW)	—	—	—	—	—
n-n stacking 相互作用	PI_Pi	距離(d)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—	—
双極子-双極子相互作用	Dipo	距離(d1)	距離(d2)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	電荷(atom1)	電荷(atom4)	—
双極子-双極子相互作用	Dipo	距離(d1)	距離(d2)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	電荷(atom2)	電荷(atom3)	—
直交多極子相互作用	OMulPol	距離(d1)	距離(d2)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	電荷差(e1)	電荷差(e2)	—
CH-n 相互作用	CH_Pi	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	距離(dNrm)	角度(θ1)	角度(θ2)
NH-n 相互作用	NH_Pi	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	距離(dNrm)	角度(θ1)	角度(θ2)
OH-n 相互作用	OH_Pi	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	距離(dNrm)	角度(θ1)	角度(θ2)
SH-n 相互作用	SH_Pi	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	距離(dNrm)	角度(θ1)	角度(θ2)
ハロゲン相互作用 I	Hal_Cl_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Cl_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Cl_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Cl_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Cl_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Cl_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Br_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Br_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Br_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Br_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Br_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_Br_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_I_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_I_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_I_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_I_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_I_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—
ハロゲン相互作用 I	Hal_I_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—

相互作用名	相互作用ラベル	項目1	項目2	項目3	項目4	項目5	項目6	項目7	項目8	項目9
NH-F 相互作用	NH_F	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—
OH-F 相互作用	OH_F	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—
SH-F 相互作用	SH_F	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—
CH-F 相互作用	CH_F	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—	—
CH-Hal相互作用	CH_Hal_Cl	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
CH-Hal相互作用	CH_Hal_Br	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
CH-Hal相互作用	CH_Hal_I	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
OH-Hal相互作用	OH_Hal_Cl	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
OH-Hal相互作用	OH_Hal_Br	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
OH-Hal相互作用	OH_Hal_I	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
NH-Hal相互作用	NH_Hal_Cl	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
NH-Hal相互作用	NH_Hal_Br	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
NH-Hal相互作用	NH_Hal_I	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
SH-Hal相互作用	SH_Hal_Cl	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
SH-Hal相互作用	SH_Hal_Br	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
SH-Hal相互作用	SH_Hal_I	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	角度(θ2)	角度(θ3)	角度(θ4)	—	—
Halogen-n 相互作用	Hal_PI_Cl	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(dNrm)	距離(d5)	距離(d6)	角度(θ1)	二面角(τ1)
Halogen-n 相互作用	Hal_PI_Br	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(dNrm)	距離(d5)	距離(d6)	角度(θ1)	二面角(τ1)
Halogen-n 相互作用	Hal_PI_I	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(dNrm)	距離(d5)	距離(d6)	角度(θ1)	二面角(τ1)
CH-S 相互作用	CH_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—
CH-S 相互作用	CH_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	角度(θ2)	—	—	—
OH-S 相互作用	OH_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—	—
OH-S 相互作用	OH_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	—	—	—	—
SH-S 相互作用	SH_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—	—
SH-S 相互作用	SH_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	—	—	—	—
NH-S 相互作用	NH_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—	—
NH-S 相互作用	NH_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	—	—	—	—
S-O 相互作用	S_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	—	—	—	—	—
S-O 相互作用	S_O	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	—	—	—	—
S-F 相互作用	S_F	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	—	—	—	—
S-F 相互作用	S_F	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	角度(θ1)	—	—	—	—	—
S-N 相互作用	S_N	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	—	—	—	—
S-n 相互作用	S_PI	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	距離(dNrm)	角度(θ1)	—	—
S-n 相互作用	S_PI	距離(d1)	距離(d2)	距離(d4)	距離(d5)	距離(dNrm)	距離(d6)	距離(d7)	角度(θ2)	二面角(τ1)
S-S 相互作用	S_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—	—
S-S 相互作用	S_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d4)	距離(d5)	角度(θ1)	—	—	—	—
S-S 相互作用	S_S	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	距離(d4)	角度(θ1)	—	—	—	—
金属と重原子との間の相互作用	Fe_X (X=水素以外の原子)	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	—	—	—	—	—	—
金属と重原子との間の相互作用	Zn_X (X=水素以外の原子)	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	—	—	—	—	—	—
金属と重原子との間の相互作用	Ca_X (X=水素以外の原子)	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	—	—	—	—	—	—
金属と重原子との間の相互作用	Mg_X (X=水素以外の原子)	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	—	—	—	—	—	—
金属と重原子との間の相互作用	Ni_X (X=水素以外の原子)	距離(d1)	距離(d2)	距離(d3)	—	—	—	—	—	—
イオンと重原子との間の相互作用	Na_X (X=水素以外の原子)	距離(d)	—	—	—	—	—	—	—	—
イオンと重原子との間の相互作用	K_X (X=水素以外の原子)	距離(d)	—	—	—	—	—	—	—	—
イオンと重原子との間の相互作用	Cl_X (X=水素以外の原子)	距離(d)	—	—	—	—	—	—	—	—

5.2 Interaction Count list ファイル

検出された相互作用数が出力されたファイル。

①ラベル	②集計結果
L#CH_Hal_I#S#S_F#Pro	0
L#CH_Hal_I#S#S_N#Pro	0
L#CH_Hal_I#S#S_O#Pro	0
L#CH_Hal_I#S#S_PI#Pro	0
L#CH_Hal_I#S#S_S#Pro	0
L#CH_Hal_I#S#Zn_X#Pro	0
L#CH_Hal_I#S#vdW#Pro	0
L#CH_N#Pro	1
L#CH_N#S	0
L#CH_N#S#CH_F#Pro	0
L#CH_N#S#CH_Hal_Br#Pro	0
L#CH_N#S#CH_Hal_Cl#Pro	0
L#CH_N#S#CH_Hal_I#Pro	0
L#CH_N#S#CH_N#Pro	0
L#CH_N#S#CH_O#Pro	0
L#CH_N#S#CH_PI#Pro	0
L#CH_N#S#CH_S#Pro	0

【①ラベル】

①ラベル	相互作用ペア
L#[相互作用ラベル]#Pro	リガンド - タンパク質
L#[相互作用ラベル]#S[N]	リガンド - 溶媒
L#[相互作用ラベル]#S[N]#[相互作用ラベル]#Pro	リガンド - 溶媒 - タンパク質
Pro#[相互作用ラベル]#S[N]	タンパク質 - 溶媒

5.3 One-hot list ファイル

検出された相互作用が one hot ベクトルで出力されたファイル
本ファイルは、リガンド-タンパク質 相互作用記述子計算機能でのみ出力されます。

【① one-hot ベクトル】

ラベル書式	相互作用ペア
LP_[相互作用ラベル]	リガンド – タンパク質
LS[N]_[相互作用ラベル]	リガンド – 溶媒
S[N]P_[相互作用ラベル]	溶媒 – タンパク質

【② 詳細情報】

項目	説明
dist	相互作用ペアの原子間距離
interaction_label	相互作用ラベル
molecular_type	相互作用ペア（リガンド、溶媒）の分子タイプ
chain	相互作用ペア（リガンド、溶媒）の Chain ID
residue	相互作用ペア（リガンド、溶媒）の残基名
residue_number	相互作用ペア（リガンド、溶媒）の残基番号
atom_name	相互作用ペア（リガンド、溶媒）の原子名
atom_number	相互作用ペア（リガンド、溶媒）の原子番号
atom_type	相互作用ペア（リガンド、溶媒）の atom_type
partner_molecular_type	相互作用ペア（タンパク質、水）の分子タイプ
partner_chain	相互作用ペア（タンパク質、水）の Chain ID
partner_residue	相互作用ペア（タンパク質、水）の残基名
partner_residue_number	相互作用ペア（タンパク質、水）の残基番号
partner_atom_name	相互作用ペア（タンパク質、水）の原子名
partner_atom_number	相互作用ペア（タンパク質、水）の原子番号
partner_atom_type	相互作用ペア（タンパク質、水）の atom_type

5.4 Interaction Sum list ファイル

検出された相互作用のグループ別集計結果が出力されたファイル。

本ファイルは、リガンド-タンパク質 相互作用記述子計算機能でのみ出力されます。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
	SP_vdW	SP_HB	SP_Elec	LP_vdW	LP_CH_X	LP_X_PI	LS_CH_X	LP_Elec	LS_Elec	LS_HB	LS_vdW	LP_Dipo	LP_HB	... ① ラベル	
	3	2	2	17	9	8	5	1	1	1	2	2	1	... ② 集計結果	

【①ラベル】

ラベル	相互作用ペア
LP_[グループ名]	リガンド – タンパク質
LS[N]_[グループ名]	リガンド – 溶媒
S[N]P_[グループ名]	溶媒 – タンパク質

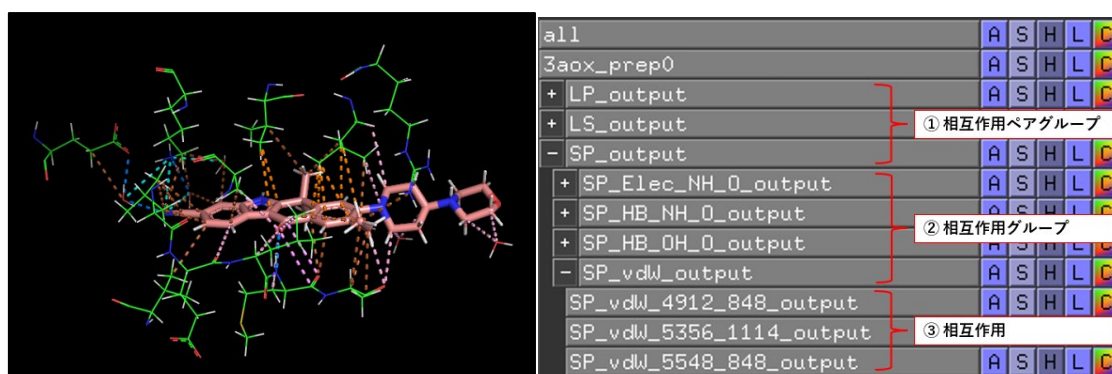
グループ	対象相互作用
HB	HB_OH_O
	HB_NH_O
	HB_OH_N
	HB_NH_N
Elec	Elec_OH_O
	Elec_NH_O
	Elec_OH_N
	Elec_NH_N
CH_X	CH_O
	CH_N
	CH_S
	CH_F
	CH_Hal_Cl
	CH_Hal_Br
	CH_Hal_I
OH_X	OH_S
	OH_F
	OH_Hal_Cl
	OH_Hal_Br
	OH_Hal_I
NH_X	NH_S
	NH_F
	NH_Hal_Cl
	NH_Hal_Br
	NH_Hal_I
SH_X	SH_O
	SH_N
	SH_S
	SH_F
	SH_Hal_Cl
	SH_Hal_Br
	SH_Hal_I
X_PI	CH_PI
	NH_PI
	OH_PI

	SH_PI
	S_PI
	Hal_PI_Cl
	Hal_PI_Br
	Hal_PI_I
Hal_X	Hal_Cl_O
	Hal_Cl_N
	Hal_Cl_S
	Hal_Br_O
	Hal_Br_N
	Hal_Br_S
	Hal_I_O
S_X	Hal_I_N
	Hal_I_S
	S_O
	S_N
	S_S
OMulPol	S_F
	OMulPol
	PI_PI
Dipo	Dipo
Metal_X	Fe_X
	Zn_X
	Ca_X
	Mg_X
	Ni_X
Ion_X	Na_X
	K_X
	Cl_X
vdW	vdW

5.5 pml ファイル

検出された相互作用を PyMol で可視化するファイル。

PyMol を起動し、構造ファイル、pml ファイルの順に読み込みを行うと相互作用が可視化される。相互作用原子を含む残基のみが表示され、各相互作用は距離オブジェクトで表示される。距離オブジェクトは、相互作用ペア、相互作用ごとにグループ分けされる。



【①相互作用ペアグループ】

相互作用ペアグループ	相互作用ペア
LP_[suffix]	リガンド - タンパク質
LS[N]_[suffix]	リガンド - 溶媒
S[N]P_[suffix]	タンパク質 - 溶媒

【②相互作用グループ】

書式：[相互作用ペアラベル]_[相互作用ラベル]_[suffix]

【③ 相互作用（距離オブジェクト）】

書式：[相互作用ペアラベル]_[相互作用ラベル]_[原子通し番号]_[原子通し番号]_[suffix]

相互作用ラベル	Color
HB_NH_N	marine
HB_NH_O	marine
HB_OH_N	marine
HB_OH_O	marine
CH_N	pink
CH_O	pink
SH_N	marine
SH_O	marine
Elec_NH_N	cyan
Elec_NH_O	cyan
Elec_OH_N	cyan
Elec_OH_O	cyan
vdW	brown
PI_PI	warmpink
Dipo	violet
OMulPol	yelloworange
CH_PI	orange
NH_PI	tv_orange
OH_PI	brightorange
SH_PI	tv_orange
Hal_Cl_N	violetpurple
Hal_Cl_O	violetpurple
Hal_Cl_S	violetpurple
Hal_Br_N	violetpurple
Hal_Br_O	violetpurple
Hal_Br_S	violetpurple
Hal_I_N	violetpurple
Hal_I_O	violetpurple
Hal_I_S	violetpurple
NH_F	palegreen
OH_F	palegreen
SH_F	palegreen
CH_F	palegreen
CH_Hal_Cl	splitpea
CH_Hal_Br	splitpea

CH_Hal_I	splitpea
NH_Hal_Cl	splitpea
NH_Hal_Br	splitpea
NH_Hal_I	splitpea
OH_Hal_Cl	splitpea
OH_Hal_Br	splitpea
OH_Hal_I	splitpea
SH_Hal_Cl	splitpea
SH_Hal_Br	splitpea
SH_Hal_I	splitpea
Hal_PI_Cl	deeppurple
Hal_PI_Br	deeppurple
Hal_PI_I	deeppurple
CH_S	sand
OH_S	chocolate
SH_S	chocolate
NH_S	sand
S_O	Splitpea
S_N	Splitpea
S_PI	lightorange
S_S	sand
S_F	sand
Fe_X	purple
Zn_X	purple
Ca_X	purple
Mg_X	purple
Ni_X	purple
Na_X	lightteal
K_X	lightteal
Cl_X	lightteal

6. 相互作用一覧

相互作用ラベル	相互作用		
HB_OH_O	水素結合 (OH-O)	CH_PI	CH-PI 相互作用
HB_NH_O	水素結合 (NH-O)	NH_PI	NH-PI 相互作用
HB_OH_N	水素結合 (OH-N)	OH_PI	OH-PI 相互作用
HB_NH_N	水素結合 (NH-N)	SH_PI	SH-PI 相互作用
Elec_OH_O	静電相互作用 (OH-O)	S_PI	S-PI 相互作用
Elec_NH_O	静電相互作用 (NH-O)	Hal_PI_Cl	ハロゲン- π 相互作用 (CH-PI)
Elec_OH_N	静電相互作用 (OH-N)	Hal_PI_Br	ハロゲン- π 相互作用 (CH-PI)
Elec_NH_N	静電相互作用 (NH-N)	Hal_PI_I	ハロゲン- π 相互作用 (CH-PI)
CH_O	CH-O 相互作用	Hal_Cl_O	ハロゲン相互作用 (Cl-O)
CH_N	CH-N 相互作用	Hal_Cl_N	ハロゲン相互作用 (Cl-N)
CH_S	CH-S 相互作用	Hal_Cl_S	ハロゲン相互作用 (Cl-S)
CH_F	CH-F 相互作用	Hal_Br_O	ハロゲン相互作用 (Br_O)
CH_Hal_Cl	CH-ハロゲン 相互作用 (CH-Cl)	Hal_Br_N	ハロゲン相互作用 (Br_N)
CH_Hal_Br	CH-ハロゲン 相互作用 (CH-Br)	Hal_Br_S	ハロゲン相互作用 (Br_S)
CH_Hal_I	CH-ハロゲン 相互作用 (CH-I)	Hal_I_O	ハロゲン相互作用 (I_O)
OH_S	OH-S 相互作用	Hal_I_N	ハロゲン相互作用 (I_N)
OH_F	OH-F 相互作用	Hal_I_S	ハロゲン相互作用 (I_S)
OH_Hal_Cl	OH-ハロゲン 相互作用 (OH-Cl)	S_O	S-O 相互作用
OH_Hal_Br	OH-ハロゲン 相互作用 (OH-Br)	S_N	S-N 相互作用
OH_Hal_I	OH-ハロゲン 相互作用 (OH-I)	S_S	S-S 相互作用
NH_S	NH-S 相互作用	S_F	S-F 相互作用
NH_F	NH-F 相互作用	OMulPol	直交する多極子相互作用
NH_Hal_Cl	NH-ハロゲン 相互作用 (NH-Cl)	PI_PI	π - π stacking 相互作用
NH_Hal_Br	NH-ハロゲン 相互作用 (NH-Br)	Dipo	双極子 - 双極子相互作用
NH_Hal_I	NH-ハロゲン 相互作用 (NH-I)	Fe_X	金属相互作用 (Fe-X)
SH_O	SH-O 相互作用	Zn_X	金属相互作用 (Zn-X)
SH_N	SH-N 相互作用	Ca_X	金属相互作用 (Ca-X)
SH_S	SH-S 相互作用	Mg_X	金属相互作用 (Mg-X)
SH_F	SH-F 相互作用	Ni_X	金属相互作用 (Ni-X)
SH_Hal_Cl	SH-ハロゲン 相互作用 (SH-Cl)	Na_X	イオン相互作用 (Na-X)
SH_Hal_Br	SH-ハロゲン 相互作用 (SH-Br)	K_X	イオン相互作用 (K-X)
SH_Hal_I	SH-ハロゲン 相互作用 (SH-I)	Cl_X	イオン相互作用 (Cl-X)
		vdW	van der waals 相互作用