



FMOデータベースの紹介と データ活用方法

渡邊千鶴

理化学研究所 生命機能研究センター



創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム
Basis for Supporting Innovative Drug Discovery and Life Science Research

科研費
KAKENHI



本日のFMODBチュートリアル資料

チュートリアル資料公開URL

<https://drugdesign.riken.jp/pub/CBI2024tut/>

[CBI学会2024年大会・第35回FMO研究会]

TS02 FMOデータベース実践チュートリアルプログラム

-生体高分子の量子化学的分子間相互作用データの活用-

更新履歴

- 2024/08/01 [CBI学会2024年大会・第35回FMO研究会] FMOデータベース実践チュートリアル のページを公開しました

チュートリアル資料

内容	リンク	メモ
チュートリアルの概要	link	CBI学会2024年大会HPへのlink
1.<チュートリアル(1)資料>FMOデータベースの紹介とデータ活用方法	link	
チュートリアル(1)の配布Data	link	※準備中
2.<チュートリアル(2)資料>FMODB データ対象とした相互作用クラスタリング解析	link	
チュートリアル(2)の配布Data	link	※準備中
<アンケート>		

チュートリアル資料

チュートリアル終了後に
アンケートにご協力お願いします。

チュートリアルに関するソフトウェア等

内容	リンク	メモ
FMODB	link	←ここからFMODBへアクセスできます。
BioStation Viewer	link	<ul style="list-style-type: none">チュートリアルでは、BioStation ViewerLiteの最新版を使用します。マニュアルはこちらです。

本チュートリアルで使用するソフトウェアとデータ

■ FMOADBのURL

<https://drugdesign.riken.jp/FMOADB/>

■ チュートリアルで使用するBioStation Viewerのバージョン

BioStationViewerLite_Open_1.0_rev23_020_b005版

■ 本チュートリアルで使用するサンプルデータ

cbi2024_fmodb_tutorial_1.zip

```
cbi2024_fmodb_tutorial_1
|-- 5P4NP
    |-- 1ere_d_amber_pieda.ajf
    |-- 1ere_d_amber_pieda_atom_charge.log
    |-- 1ere_d_amber_pieda.cpf
    |-- 1ere_d_amber_pieda_fragment_charge.log
    |-- 1ere_d_amber_pieda_IFIE.log
    |-- 1ere_d_amber_pieda_IFIE_MAP.log
    |-- 1ere_d_amber_pieda.out
    |-- 1ere_d_amber_pieda.pdb
    |-- 1ere_d_amber_pieda_PIEDA.log
    |-- 1ere_d_amber_pieda_PIEDA_MAP.log
```

- 
- ネットワークがうまくつながらなかった場合に使用します。
 - ファイルの中身の詳細は、実際に使用する箇所で説明を記載します。

目次

1. FMOODBの紹介と基本的な操作方法

- FMO法の概要
- FMOODBの概要
- FMOODBの基本操作・チュートリアル(1)
- FMOODBデータの検索機能・チュートリアル(2)
- FMOODBデータのWeb API機能

2. FMOODBデータ活用方法

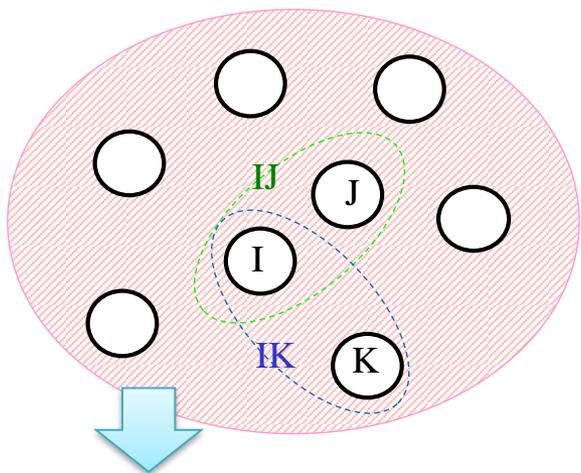
- FMOODBデータの活用事例
- PIEDA解析(シングル/マルチフラグメント解析)
- Web APIを用いた相互作用解析
- IFIE-diagram解析

3. まとめ

フラグメント分子軌道(FMO)法

K. Kitaura *et al.*, *CPL* (1999)
 S. Tanaka, *et al.*, *PCCP* (2014)
 D.G. Fedorov *et al.*, *JCC* (2006)

- 1999年に北浦和夫教授(京大)らが提案した日本発のfull QM手法。
- **数千残基のタンパク質の全体構造を迅速に量子化学計算**することが可能な手法。
- MP2法でMO計算は $O(N^5)$ であるところを、FMO計算は $O(N^2)$ に削減。

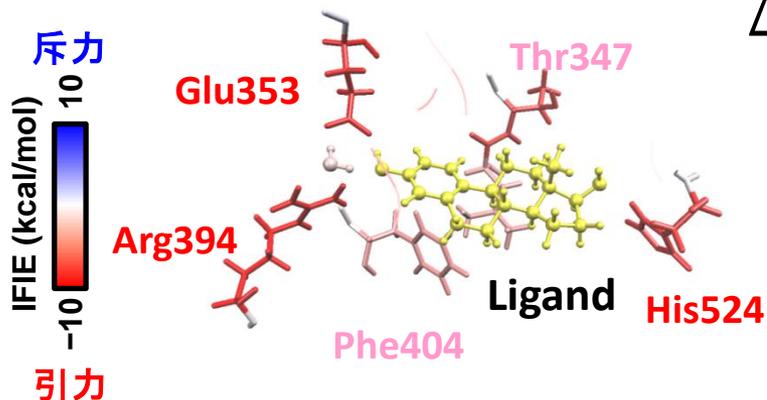


全エネルギー:

$$E_{\text{total}} = \sum_I E'_I + \sum_{I>J} \Delta\tilde{E}_{IJ} + \sum_{I>J>K} \Delta\tilde{E}_{IJK} + \sum_{I>J>K>L} \Delta\tilde{E}_{IJKL} + \dots$$

FMO2ではモノマーとダイマーのエネルギーから全エネルギーを算出

巨大分子をフラグメントに分割
(アミノ酸残基、リガンド単位)



フラグメント間相互作用エネルギー(IFIE, PIE):

$$\Delta\tilde{E}_{IJ} = \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{ES}}}_{\text{静電相互作用}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{EX}}}_{\text{交換反発相互作用}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{CT+mix}}}_{\text{電荷移動相互作用}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{DI}}}_{\text{分散力相互作用}}$$

電子的な挙動まで考慮した相互作用解析が定量的に可能に!

Binding affinity

$$\sum \Delta E_{IJ} \sim -k_B T \ln IC_{50}$$

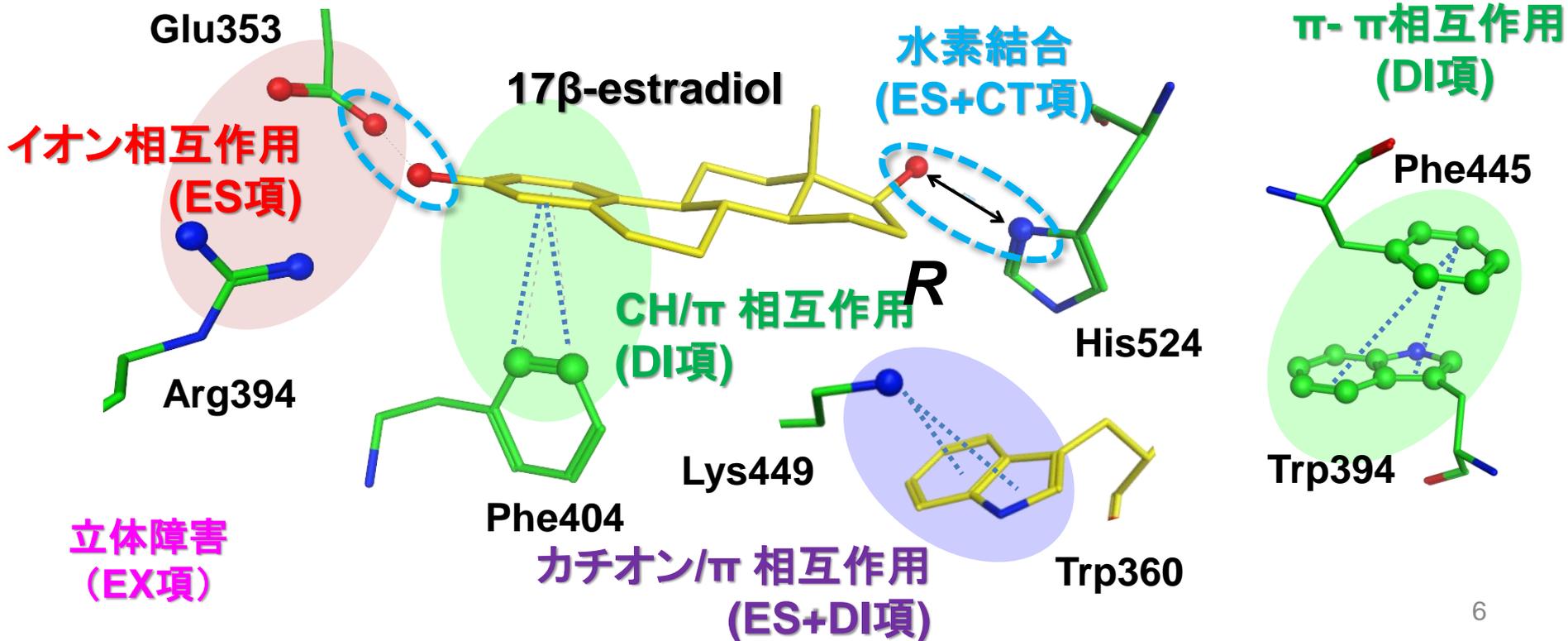
相互作用エネルギー成分分割解析

Pair interaction energy decomposition analysis (PIEDA)

$$\Delta\tilde{E}_{IJ} = \underbrace{\Delta E_{IJ}^{ES}}_{\substack{\text{静電} \\ \text{相互作用} \\ \text{(ES項)}}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{EX}}_{\substack{\text{交換反発} \\ \text{相互作用} \\ \text{(EX項)}}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{CT+mix}}_{\substack{\text{電荷移動} \\ \text{相互作用} \\ \text{(CT+mix項)}}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{DI}}_{\substack{\text{分散力} \\ \text{相互作用} \\ \text{(DI項)}}$$

古典力場ベースの相互作用

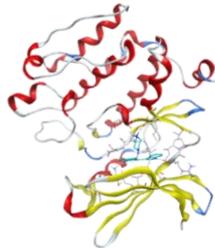
$$\Delta E_{IJ}^{MM} = \underbrace{E_{IJ}^{ele}}_{\substack{\text{静電} \\ \text{相互作用} \\ \text{(ES項)}}} + \underbrace{E_{IJ}^{vdW}}_{\substack{\text{vdW} \\ \text{相互作用} \\ \text{(EX+\alpha項)}}$$



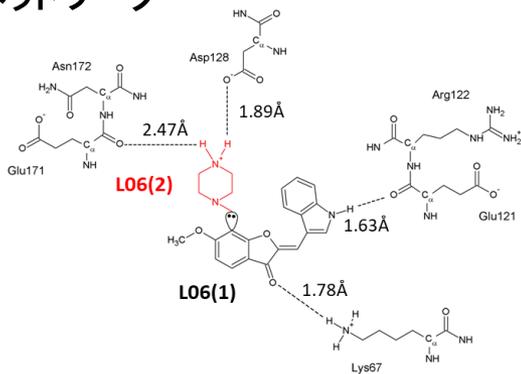
IFIE/PIEDAによる相互作用解析

Pim1キナーゼ

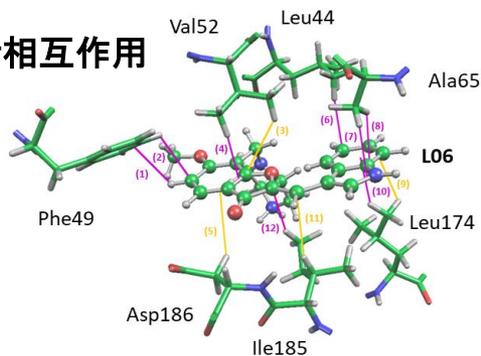
PDB ID: 5VUC



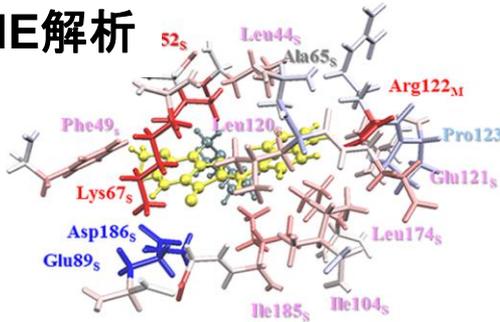
水素結合
ネットワーク



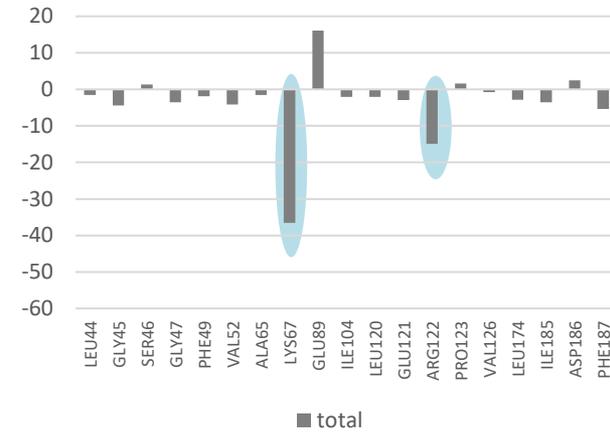
CH/π相互作用



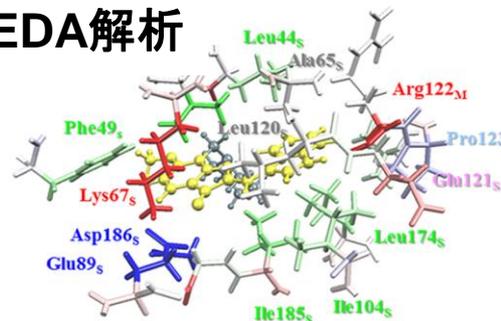
IFIE解析



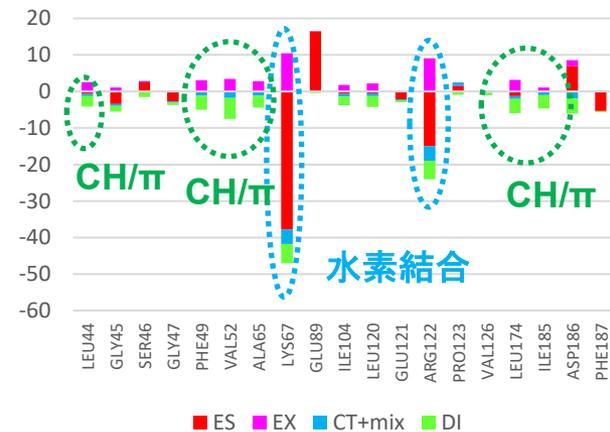
MP2
-5 +5
 ΔE^{FMO3} (kcal/mol)



PIEDA解析



ES
-5 +5
DI
-5 0
 ΔE^{FMO2} (kcal/mol)



水素結合だけでなく、
CH/π相互作用の寄与が確認！

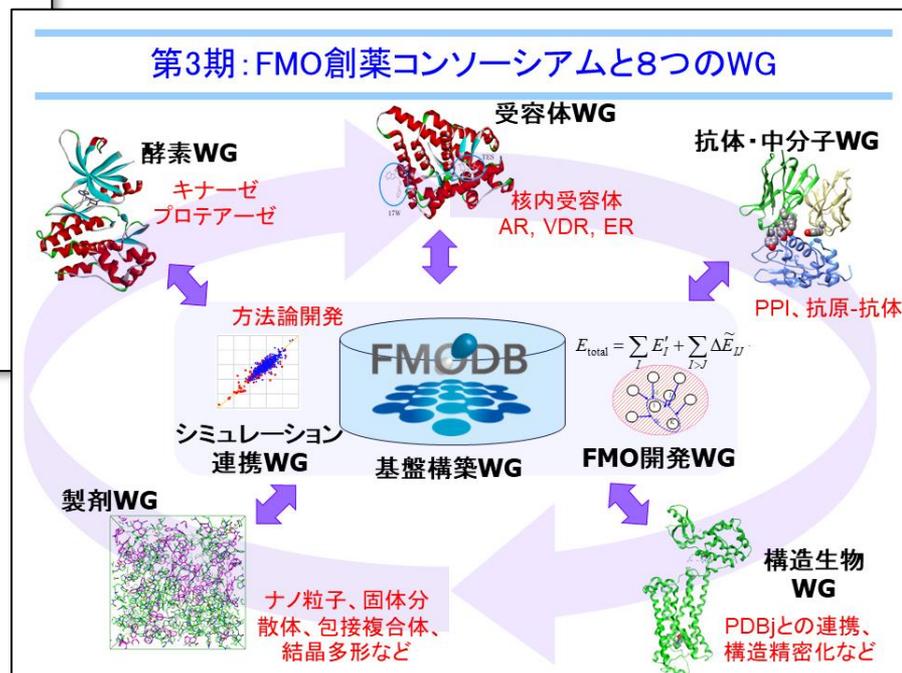
FMO創薬コンソーシアム

随時メンバー募集中！

<https://fmodd.jp/>

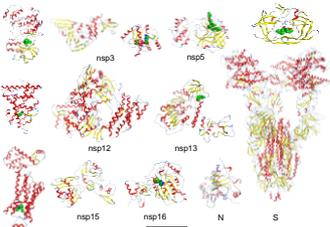
The screenshot shows the website for the FMO Drug Design Consortium (FMOOD). The header includes the logo and the text 'FMO創薬コンソーシアム' with Japanese and UK flags. A sidebar on the left contains navigation links: ホーム, 研究内容, メンバー, イベント情報, 研究成果, 論文リスト, 入会案内・お問い合わせ, and リンク. The main content area features a section titled 'FMOODとは' with a description of the consortium's goals and a diagram titled 'Fragment molecular orbital drug design consortium (FMOOD)' showing 'Binding affinity prediction', 'Energy decomposition', and 'Interaction pattern clustering'. Below this is a 'トピックス' section with recent news items from 2021.

- 富岳でFMO計算することが出来、HPCI資源で計算したものはFMOODBで公開出来る。
- 論文にFMOODB IDを載せられ、FMOODBには論文のリファレンス載せられる。
- 8つのWGがあり、計算方法の相談、結果の議論なども行える。→昨年度よりプロジェクト制に変更。



FMODBの構築

- 世界初の大規模な生体高分子の量子化学計算データベース
- **37,450**エントリー(**7,783**PDB)を公開中
- 簡易的にWebインターフェース上でIFIE解析可能
- FMO計算結果一式ダウンロード可能
- FMO創薬コンソーシアムを中心にデータ収集



<https://drugdesign.riken.jp/FMODB>

English 日本語

Advanced Search Restful API Download Manual

FMODB FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2024-07-23
All entries: 37450
Number of unique PDB entries: 7783

Information ID Search Keyword Search Blast Search Ligand Structure Search

2024.10.28 **Web API** The FMODB RESTful API, which was developed as a beta version, was officially released on October 28, 2024. [here](#).

2024.6.24 **PDBj collab** We have started collaboration with the **PDBj** (Protein Data Bank Japan) database through mutual links. [here](#).

2020.4.17 **COVID-19** FMO data for COVID-19 related proteins have been released on Apr 17, 2020. [here](#).

Category

- COVID-19
- X-ray All Entries
- NMR All Entries (104)
- MD All Entries (12292)
- ElectronMicroscopy All Entries (52)
- Docking All Entries (30)
- Others All Entries (57)

Search Sample

Keyword Search: COVID-19 [Set Value Of Input](#)
PDB ID Search: 1ERE [Set Value Of Input](#)
FMODB ID Search: 5P4NP [Set Value Of Input](#)
UniProt ID Search: P03372 [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Target): Estrogen receptor alpha [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Ligand): NHI [Set Value Of Input](#)
Blast Search: Sequence of 3RIN / E-Value Cutoff E-148 [Set Value Of Input](#)

FMODBの主な用途

FMO計算結果の解析
(IC50との相関、PIEDAなど)

FMO力場開発の基礎データ

医薬品設計への利用
(新しい置換基の提案など)

ジャーナルなどへの
投稿の際に利用
(PDBのデポジットに近い感覚)

構造生物学との連携



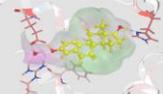
AI創薬

FMODB:登録データ概要

<https://drugdesign.riken.jp/FMODB>



FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2024-07-23
All entries: 37450
Number of unique PDB entries: 7783



Information ID Search Keyword Search Blast Search Ligand Structure Search

- 2024.10.28 **Web API** The FMODB RESTful API, which was developed as a beta version, was officially released on October 28, 2024. [here](#).
- 2024.6.24 **PDBj collab** We have started collaboration with the **PDBj** (Protein Data Bank Japan) database through mutual links. [here](#).
- 2020.4.17 **COVID-19** FMO data for COVID-19 related proteins have been released on Apr 17, 2020. [here](#).

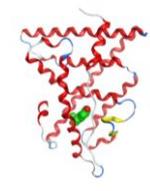
Category

- COVID-19
- X-ray All Entries
- NMR All Entries (104)
- MD All Entries (12292)
- ElectronMicroscopy All Entries (52)
- Docking All Entries (30)
- Others All Entries (57)

Search Sample

Keyword Search: COVID-19 [Set Value Of Input](#)
PDB ID Search: 1ERE [Set Value Of Input](#)
FMODB ID Search: 5P4NP [Set Value Of Input](#)
UniProt ID Search: P03372 [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Target): Estrogen receptor alpha [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Ligand): NHI [Set Value Of Input](#)
Blast Search: Sequence of 3RIN / E-Value Cutoff E-148 [Set Value Of Input](#)

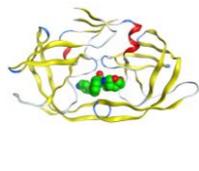
主要な元構造の構造解析手法、
創薬ターゲットタンパク質など
カテゴリー毎にリスト



Nuclear receptor



Kinase



Protease



GPCR

Watanabe C *et al.*, *CBI J.*, 19, 5–18, 2019.

Takaya D, Watanabe C *et al.*, *J. Chem. Inf. Model.*, 61, 777-794, 2021

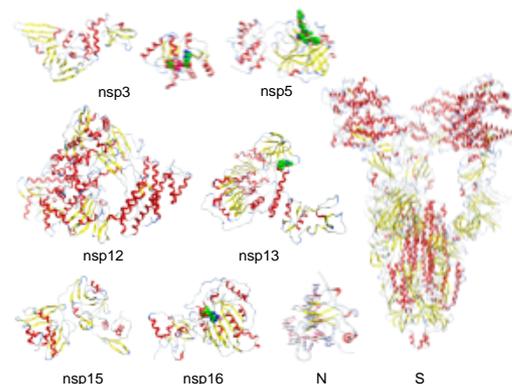
Fukuzawa K *et al.*, *J. Chem. Inf. Model.*, 2021, 61, 4594-4612, 2021.

最新情報

- PDBjとの連携特集ページ

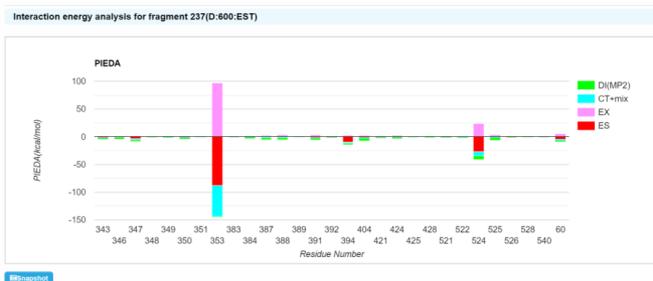
Cooperation with PDBj: Improvement of convenience by mutual linkage (Figure 1)

- COVID-19関連タンパク質特集ページ

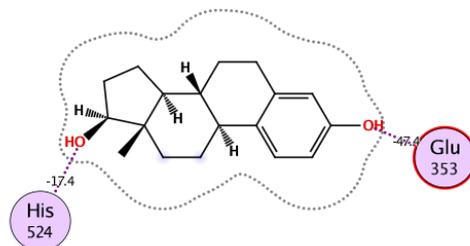


FMODB:Webインターフェイスに搭載した主な解析機能

PIEDA解析



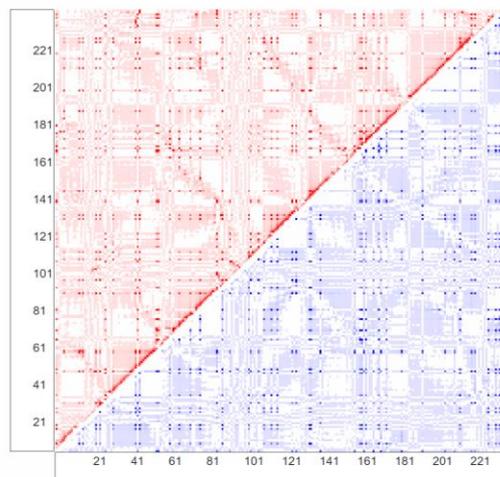
リガンド相互作用解析



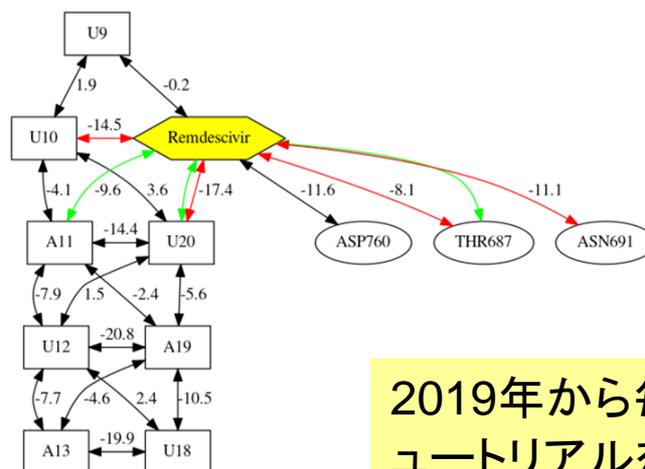
WebAPI解析

```
{ "Lists": [{"Fmodbid": "V2G31", "Content": {"FMODB_registration_note_data_format": "0.1", "SUM_M_Fragment_numbers": "1-112,114-318", "SUM_N_Fragment_numbers": "319", "PIEDA_SUM_ES": "-141.4486", "PIEDA_SUM_EX": "84.6444", "PIEDA_SUM_CT": "-39.4898", "PIEDA_SUM_DI_MP2": "-85.3411", "PIEDA_SUM_q_UJ": "0.2160", "SUM_TOTAL": "-181.6351", "IFIE_SUM_MP2": "-181.6351", "IFIE_SUM_HF": "-96.2940", "Binding_Energy_Label": "Ligand binding energy without solvent", "note": "This value is summation of IFIE between receptor and ligand fragments without solvent fragments."}, ...}, {"Fmodbid": "1JLMZ", "Content": {"FMODB_registration_note_data_format": "0.1", "SUM_M_Fragment_numbers": "1-144,146-304", "SUM_N_Fragment_numbers": "305", "PIEDA_SUM_ES": "-28.6184", "PIEDA_SUM_EX": "25.6170", "PIEDA_SUM_CT": "-8.5558", "PIEDA_SUM_DI_MP2": "-32.3115", "PIEDA_SUM_q_UJ": "0.0014", "SUM_TOTAL": "-43.8687", "IFIE_SUM_MP2": "-43.8687", "IFIE_SUM_HF": "-11.5572", "Binding_Energy_Label": "Ligand binding energy", "note": "removed the IFIE of CYS145 "}}, {"Count": 3}]
```

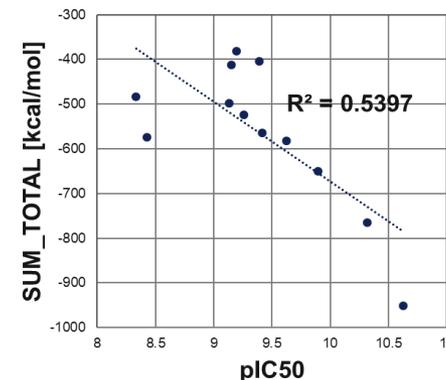
IFIE-MAP解析



IFIE-diagram解析



MDデータの一括解析



2019年から毎年CBI年会にてFMODBチュートリアルを開催しアンケートを実施することで普及とユーザーのニーズを調査

FMODB:操作マニュアル、FMODBとデータについて

FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2024-07-23
All entries: 37450
Number of unique PDB entries: 7783

Information | ID Search | Keyword Search | Blast Search | Ligand Structure Search

2024.10.28 [Web API](#) The FMODB RESTful API, which was developed as a beta version, was officially released on October 28, 2024. [here](#).

2024.6.24 [PDBj collab](#) We have started collaboration with the [PDBj](#) (Protein Data Bank Japan) database through mutual links. [here](#).

2020.4.17 [COVID-19](#) FMO data for COVID-19 related proteins have been released on Apr 17, 2020. [here](#).

Category

COVID-19

X-ray All Entries

[NMR All Entries\(104\)](#)

[MD All Entries\(12292\)](#)

[ElectronMicroscopy All Entries\(52\)](#)

[Docking All Entries\(30\)](#)

[Others All Entries\(57\)](#)

Search Sample

Keyword Search: COVID-19 [Set Value Of Input](#)

PDB ID Search: 1ERE [Set Value Of Input](#)

FMODB ID Search: 5P4NP [Set Value Of Input](#)

UniProt ID Search: P03372 [Set Value Of Input](#)

Keyword Search(Target): Estrogen receptor alpha [Set Value Of Input](#)

Keyword Search(Ligand): NHI [Set Value Of Input](#)

Blast Search: Sequence of 3RIN / E-Value Cutoff E-148 [Set Value Of Input](#)

All of calculated data by FMO Drug Design (FMODD) Consortium are licensed under CC BY-SA 4.0. [Citing Us.](#)

Copyright © 2018 FMODD Consortium. All Rights Reserved.

Overview

About Us

Acknowledgements

Citing Us

Highlights

Collaboration with PDBj

Covid-19

Data Search

Advanced Search

Web API

Manual

01 Search

02 Result

03 Detail

04 IFIE Interaction Map

Support

Contact to FMODB managers.

- FMODBとデータについて
 - FMODBについて
 - 謝辞
 - 引用
- 最新情報
 - PDBjとの連携
 - COVID-19特集
- データ検索
 - Advanced Search
 - Web API
- FMODBの操作マニュアル
 - 検索
 - 検索結果
 - 詳細ページ
 - IFIE-MAP
- サポート
 - FMODBに関する問い合わせ窓口

All of calculated data by FMO Drug Design (FMODD) Consortium are licensed under CC BY-SA 4.0.
[Citing Us.](#)

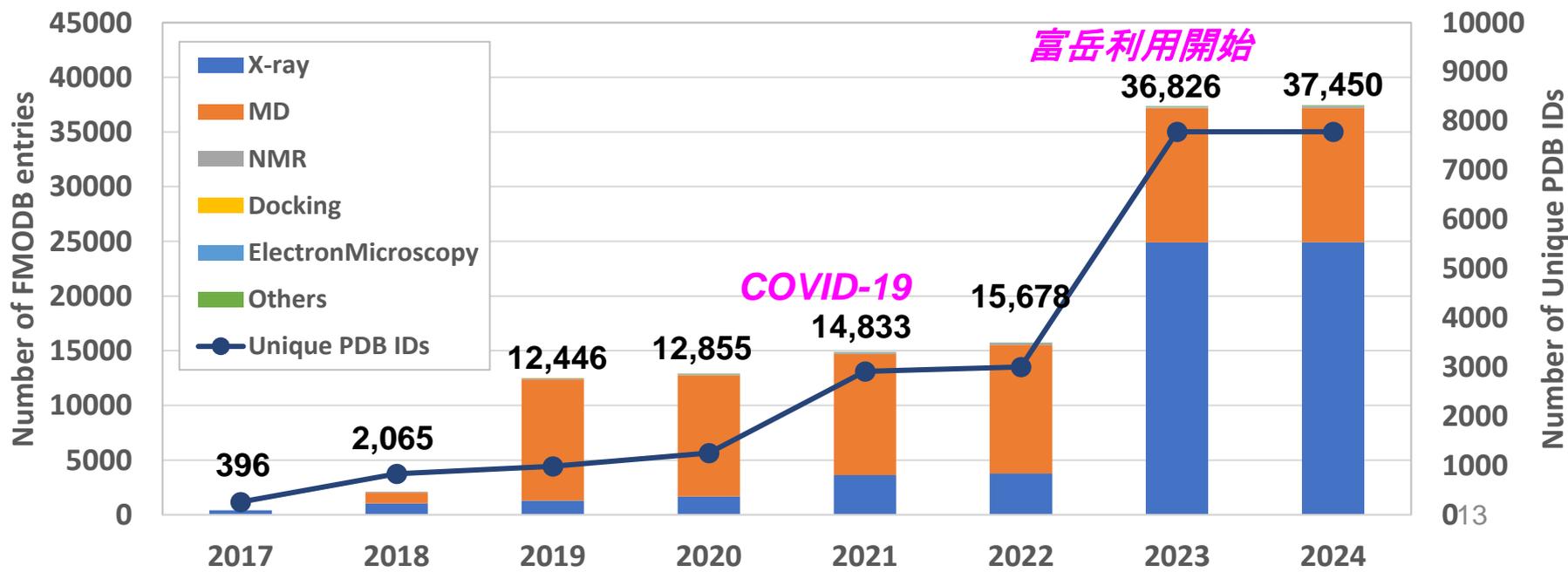
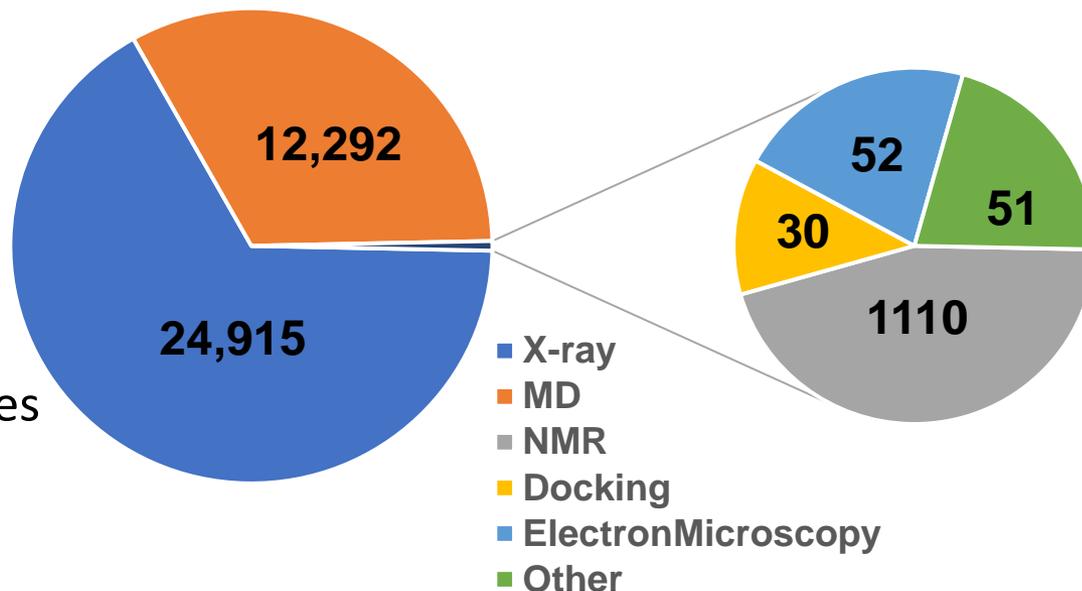


FMODB: 登録データ推移

公開版FMODB (37,450 entries)

ABINIT-MP: 37,448 entries

GAMESS: 2 entries

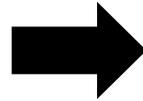


FMODB:GAMESSデータ

GAMESSデータ

- Logファイル
- PDBファイル
- Inpファイル

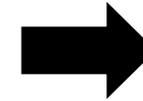
CPFファイル
への変換



GAMESSデータ

- Logファイル
- PDBファイル
- Inpファイル
- CPFファイル

CPFファイル
でデータ登録



CPFファイルに変換することで、**BioStation Viewer**で解析可能！

現在、2件のGAMESSデータを登録・公開中

**GAMESSデータによる
データの拡充**

FMODB ID: VRRR1
Calculation Name: 1UAG-A-Other325
Preferred Name:
Target Type:
Ligand Name:
ligand 3-letter code:
PDB ID: 1UAO
Chain ID: A
ChEMBL ID:
UniProt ID:
Base Structure: SolutionNMR
Registration Date: 2021-10-12
Reference:
DOI:

**Chignolin
ミニタンパク質**

FMO method	FMO-MP2/6-31G*
Fragmentation	Manual
Number of fragment	10
LigandCharge	
Software	GAMESS

FMO calculation

FMO method	FMO-MP2/6-31G*
Fragmentation	Manual
Number of fragment	10
LigandCharge	
Software	GAMESS

**FMODB ID: VRRR1
PDB ID: 1UAO**

FMODB ID: 1447Z
Calculation Name: 3OLS-A-Xray326
Preferred Name: Estrogen receptor beta
Target Type: SINGLE PROTEIN
Ligand Name: estradiol
ligand 3-letter code: EST
PDB ID: 3OLS
Chain ID: A
ChEMBL ID: CHEMBL242
UniProt ID: Q9Z7J1
Base Structure: X-ray
Registration Date: 2021-10-19
Reference:
DOI:

**ERβ-EST
複合体**

FMO method	FMO-MP2/6-31G*
Fragmentation	Manual
Number of fragment	232
LigandCharge	
Software	GAMESS

FMO calculation

FMO method	FMO-MP2/6-31G*
Fragmentation	Manual
Number of fragment	232
LigandCharge	
Software	GAMESS

**FMODB ID: 1447Z
PDB ID: 3OLS**

外部連携:PDBjとのFMODBの連携

PDBjとFMODBの相互リンクについて

2023/4/21

大阪大学蛋白質研究所・PDBjへ訪問

PDBjの栗栖先生とデータベース担当者の方と打合せ



FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2023-12-27
All entries: 36904
Number of unique PDB entries: 7778

Criteria for ID Search
ID: 1ERE

Base Structure: X-ray NMR MD ElectronMicroscopy Docking Others

Summary for all items(csv file) Summary for checked items(csv files)
 Calculation Data(zip files; checked items up to 10 data) CheckPoint File(checked items up to 10 data)

Download

Search Result: 6 Hits Currently showing: 1-6 Page: 1/1 Displaying results: 10 50 100

Sort Display only checked items

check / uncheck all items on this page



Cooperation

PDBj

1ERE

HUMAN ESTROGEN RECEPTOR LIGAND-BINDING DOMAIN IN COMPLEX WITH 17BETA-ESTRADIOL

1ERE 概要

エンタリ-DID: 10.22106/1erepdb

分析種別: ESTROGEN RECEPTOR, ESTRADIOL, CYP19A1A, SUGAR

配列の長さ: nuclear receptor, transcription factor, steroid, agonist

由来する生物種: Homo sapiens (Human)

配列の位置: Inframe 1: Nucleus, Inframe 2: Nucleus, 233222

分子量: 6

化学的組成: C122H164O42

分子量計算: 22288.42

分子量測定: 22288.42 (測定: 1997-09-06, 誤差: 1998-09-16, 最終更新: 2011-07-13)

研究者: Rosenzberg, A.H., Papp, A.C., Davies, J., Hubbard, R.E., Ahern, T., Rogerson, D., Ohman, L., Greene, G.L., Gustafsson, J.A., Carlsson, K.
Molecular basis of agonism and antagonism in the oestrogen receptor.
Nature, 393, 717-720, 1997

DOI: 10.1038/393717a

PMID: 9325223

DOI: 10.1038/393717a

主眼図表: 1ERE (1ERE) 1ERE (1ERE) 1ERE (1ERE) 1ERE (1ERE) 1ERE (1ERE)

実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.1 Å)

相関図レポート

Metric	Percentile Ranks	Value
Rfree	0.218	0.218
Clashscore	18	18
Ramachandran outliers	0	0
Sidechain outliers	11.9%	11.9%
RSRZ outliers	0.4%	0.4%

Legend:
■ Percentile relative to all X-ray structures
■ Percentile relative to X-ray structures of similar resolution

PDBj, NDC, JBI

5P4NP

FMODB ID: 5P4NP

Calculation Name: 1ERE-D-Xray7

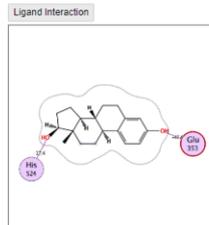
Preferred Name: Estrogen receptor alpha

PDB ID: 1ERE **Link to PDBj**

Chain ID: D

UniProt ID: P03372

ChEMBL ID: CHEMBL206



Database information

FMODB

5P4NP **Link to FMODB**

P2KNR

PZ2VN

X63YZ

XQ8VY

XR188

「その他のデータベース情報」のところに FMODBで計算されたPDBエントリーについて 相互リンクを張ることで連携開始！（2024年1月）

目次

1. FMOODBの紹介と基本的な操作方法

- FMO法の概要
- FMOODBの概要
- FMOODBの基本操作・チュートリアル(1)
- FMOODBデータの検索機能・チュートリアル(2)

2. FMOODBデータ活用方法

- FMOODBデータの活用事例
- PIEDA解析(シングル/マルチフラグメント解析)
- Web APIを用いた相互作用解析
- IFIE-diagram解析

3. まとめ

チュートリアル(1):FMODBの基本操作

- FMODBにアクセスして、PDB ID=**1ERE**を検索する。
- 検索結果の確認を行い、FMODB ID=**5P4NP**のエントリーの詳細ページにアクセスしてPIEDA解析を実施してみる。
- FMO計算結果一式(FMODB ID=**5P4NP**)のデータをダウンロードして、BioStation ViewerでPIEDA解析を実施する。



スライド左上にこのマークがあるスライドの内容は、チュートリアル操作に含まれます

FMODBのHPに関する参考資料 (2022年度FMODBチュートリアル資料)

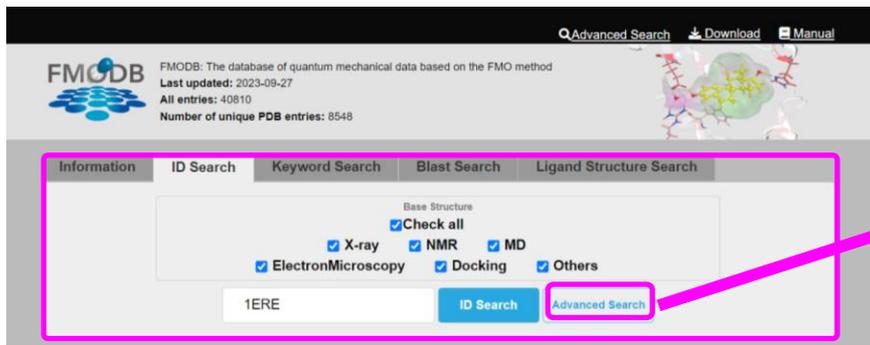
1.<チュートリアル(1)資料>

[FMODBの紹介, 動的平均FMOリガンド-タンパク質間相互作用解析](#)



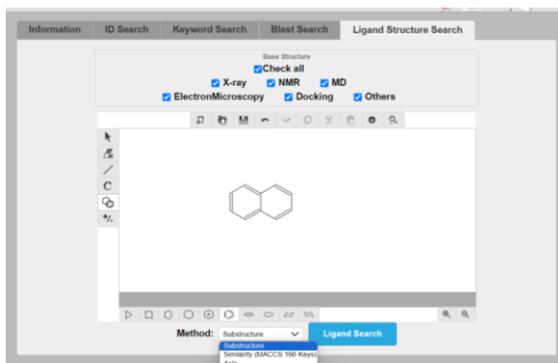
FMODB:検索機能

基本検索機能 (HPに実装)



タブで検索機能移動

- ID検索(e.g., PDB, UniProt, FMODB)
- Keyword検索
(e.g.,タンパク質名、化合物名)
- Blast検索
- 化合物構造検索



Advanced検索機能 (別ウィンドウ立上げ)

Advanced Search

Basic

FMODB ID: 5P4NP,4PK3P,... PDB ID: 1ERE,1BVE,...

UniProt ID: P03372 ChEMBL ID: ChEMBL4630 Calculation Name: 1ERE-D-Xray7

All X-ray NMR MD ElectronMicroscopy

Docking Others

Preferred Name: Estrogen receptor alpha Target Type: Choose... Chain ID: A

With Ligand Ligand Name: estradiol Ligand Code: NHI

Reference: Projecte Name:

DOI: Registration Start Date: Registration End Date:

Modeling method

Optimization: MOE:Amber10:EHT Restraint: OptH Protonation: MOE:Protonate 3D Complement: MOE:Structure Prepar

Water: All crystal waters in PDB. Procedure: Auto-FMO protocol ver. 1

FMO calculation

FMO method: FMO2-MP2 / 6-31G(d) Fragmentation: Auto

Software: Choose...

Search

今までは、分子構造の基本情報のみ検索可能であったが、Advanced検索機能により、構造モデリング、FMO計算など複数条件で検索可能



FMODB:検索サンプル

English 日本語

Advanced Search Restful API Download Manual

FMODB FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2024-07-23
All entries: 37450
Number of unique PDB entries: 7783

Information ID Search Keyword Search Blast Search Ligand Structure Search

Base Structure
 Check all
 X-ray NMR MD
 ElectronMicroscopy Docking Others

1ERE ID Search Advanced Search

Category

- COVID-19
- X-ray All Entries
- [NMR All Entries\(104\)](#)
- [MD All Entries\(12292\)](#)
- [ElectronMicroscopy All Entries\(52\)](#)
- [Docking All Entries\(30\)](#)
- [Others All Entries\(57\)](#)

Search Sample

Keyword Search: COVID-19 [Set Value Of Input](#)
PDB ID Search: 1ERE [Set Value Of Input](#)
FMODB ID Search: 5P4NP [Set Value Of Input](#)
UniProt ID Search: P03372 [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Target): Estrogen receptor alpha [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Ligand): NHI [Set Value Of Input](#)
Blast Search: Sequence of 3R1N / E-Value Cutoff E-148 [Set Value Of Input](#)

検索事例サンプル
各リンクを押すと検索事例
が検索ウィンドウに反映



FMODB:検索結果一覧

Advanced Search Download Manual

FMODB FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
 Last updated: 2023-09-27
 All entries: 40810
 Number of unique PDB entries: 8548

Criteria for ID Search
 ID: 1ERE
 Base Structure: X-ray NMR MD ElectronMicroscopy Docking Others

Summary for all items(csv file) Summary for checked items(csv files)
 Calculation Data(zip files; checked items up to 10 data) CheckPoint File(checked items up to 10 data) **Download**

Search Result: 7 Hits Currently showing: 1-7 Page: 1 / 1 Displaying results: 10 50 100

Sort Display only checked items **Sort Results**

check / uncheck all items on this page

5P4NP
 FMODB ID: 5P4NP
 Calculation Name: 1ERE-D-Xray7
 Preferred Name: Estrogen receptor alpha
 PDB ID: 1ERE
 Chain ID: D
 UniProt ID: P03372
 ChEMBL ID: ChEMBL206
 Base Structure: X-ray
 Registration Date: 2017-02-24
 Reference:
 Modeling method
 Optimization: MOE:Amber10:EHT
 Restraint: OptH
 Procedure: Manual calculation
 FMO calculation
 FMO method: FMO2-MP2/6-31G(d)
 FMO2-HF: Total energy (hartree): -98213.362736
 FMO2-MP2: Total energy (hartree): -98490.505804

Ligand Interaction

Ligand:EST

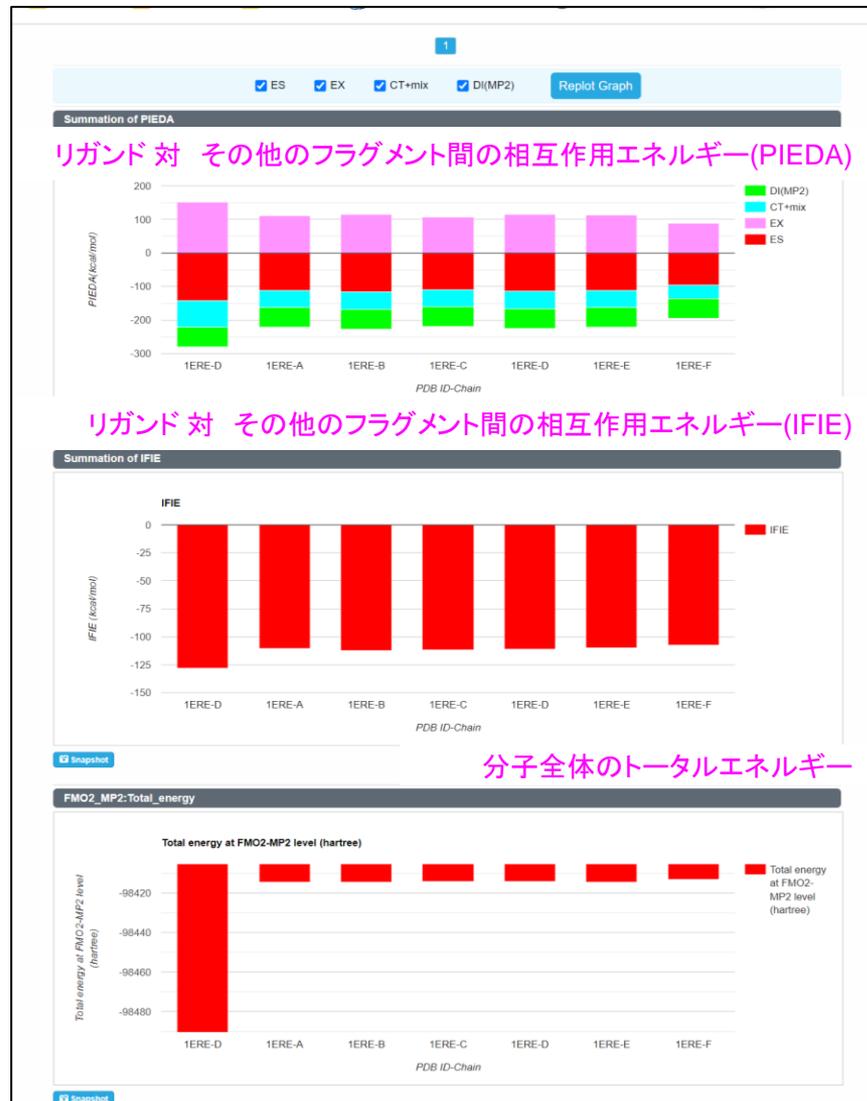
IFIE [kcal/mol]	PIEDA [kcal/mol]				Charge transfer value [e]	
	ES	EX	CT+mix	DI(MP2)	q[=>J]	
IFIE SUM	-141.441	151.973	-80.080	-58.392	0.192	
	-127.936					

XQ8VY
 FMODB ID: XQ8VY
 Calculation Name: 1ERE-A-Xray1
 Preferred Name: Estrogen receptor alpha
 PDB ID: 1ERE
 Chain ID: A
 UniProt ID: P03372
 ChEMBL ID: ChEMBL206

Ligand Interaction

検索結果下部

検索結果データに対するエネルギー評価





FMODB:検索結果一覧

各エントリーデータ情報

□ [5P4NP](#)

FMODB ID

Calculation Name = [PDB ID] + [Chain ID] + [BaseStructure] + [Model]

FMODB ID: 5P4NP

Calculation Name: 1ERE-D-Xray7

Preferred Name: Estrogen receptor alpha

PDB ID: [1ERE](#)

Chain ID: D

UniProt ID: [P03372](#)

ChEMBL ID: [CHEMBL206](#)

Base Structure: X-ray

Registration Date: 2017-02-24

Reference:

Modeling method

Optimization: MOE:Amber10:EHT

Restraint: OptH

Procedure: Manual calculation

FMO calculation

FMO method: FMO2-MP2/6-31G(d)

FMO2-HF: Total energy (hartree): -98213.362736

FMO2-MP2: Total energy (hartree): -98490.505804

Ligand binding energy

IFIE [kcal/mol]	PIEDA [kcal/mol]				Charge transfer value [e]
IFIE SUM	ES	EX	CT+mix	DI(MP2)	q(I=>J)
-127.936	-141.441	151.973	-80.080	-58.392	0.192

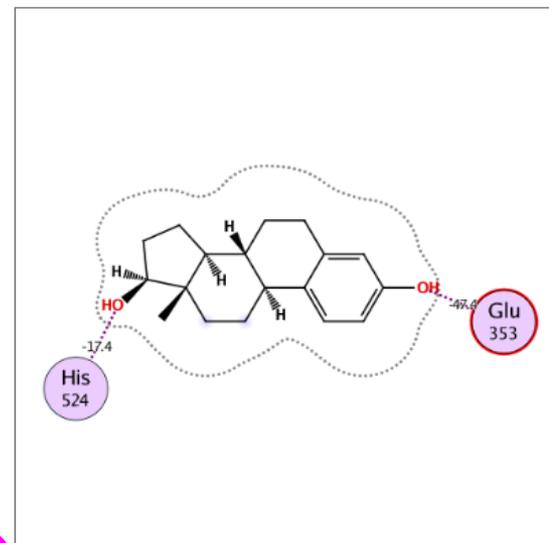
タンパク質のアノテーション

- データ登録日
- リファレンス情報

構造の前処理条件

- 最適化手法
- 拘束条件
- 手動/Auto-FMOプロトコル

Ligand Interaction



Ligand:EST

FMO計算結果

- FMO計算手法
- トータルエネルギー
- 分子間結合エネルギー



FMODB:各エントリーの詳細ページ

FMODB FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
 Last updated: 2021-09-07
 All entries: 16548
 Number of unique PDB entries: 3286

FMODB ID: 5P4NP

**FMODB ID
によって管理**

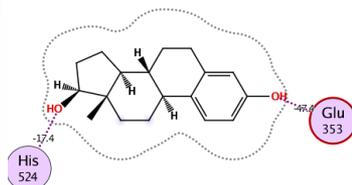
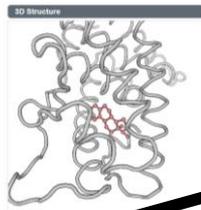
Preferred Name: Estrogen receptor alpha
 Target Type: SINGLE PROTEIN
 Ligand Name: estradiol
 Ligand 3-letter code: EST
 PDB ID: 1ERE
 Chain ID: D
 ChEMBL ID: CHEMBL206
 UniProt ID: P03372
 Base Structure: X-ray
 Registration Date: 2017-02-24
 Reference:
 DOI:

**FMO計算結果一式
ダウンロード可能**

IFIE MAP
 Download Files

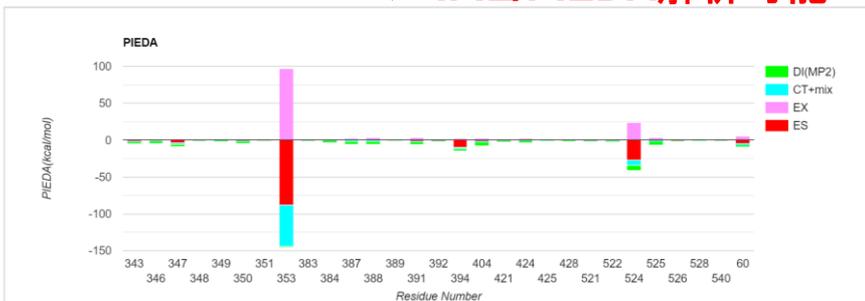
Modeling method

Optimization	MOE:Amber10EHT
Restraint	OptH
Protonation	MOE:Protonate3D
Complement	BioStationViewer:StructureComplementation (agonist template: 1A52)
Water	A bridging water among Glu353, Arg394 and ligand.
Procedure	Manual calculation



**Webインターフェース上で
IFIE/PIEDA解析可能**

Interaction energy analysis for fragment 237(D:600:EST)

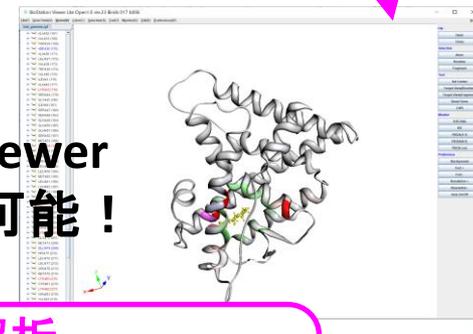


FMO計算結果一式 (5P4NP.zip)

- 1ere_d_amber_pieda.ajf **ABINIT-MP入力ファイル**
- 1ere_d_amber_pieda.cpf **CPFファイル**
- 1ere_d_amber_pieda.out **ABINIT-MP出力ファイル**
- 1ere_d_amber_pieda.pdb **PDBファイル**
- 1ere_d_amber_pieda_atom_charge.log
- 1ere_d_amber_pieda_fragment_charge.log
- 1ere_d_amber_pieda_IFIE.log
- 1ere_d_amber_pieda_IFIE_MAP.log
- 1ere_d_amber_pieda_PIEDA.log
- 1ere_d_amber_pieda_PIEDA_MAP.log

**FMODB
登録
データ**

**BioStation Viewer
で詳細解析可能!**



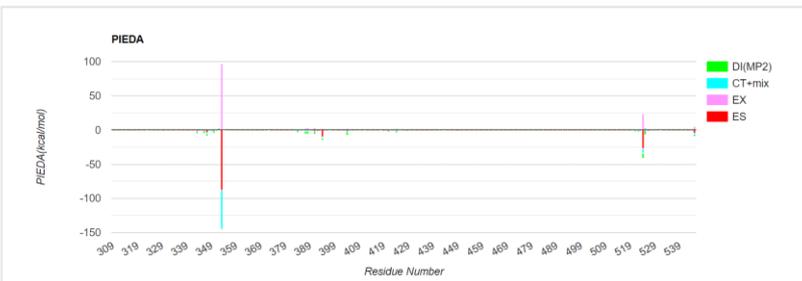
- IFIE/PIEDA解析
- 原子電荷解析
- ダイポールモーメント解析



FMODB:PIEDA解析

詳細ページの下部にはその複合体の相互作用エネルギー(IFIE, PIEDA)をグラフ表示できる簡易解析機能がある

Interaction energy analysis for fragmet #237(D:600:EST)



グラフ表示範囲の絞り込み機能

Base fragment(s) of PIEDA/IFIE

Single fragment Multi fragments

237(D:600:EST)Lignad

[Fragment list](#)

Charge [e] FCHARGE : 0 / q_Mulliken : -0.191 / q_NPA : *****

Distance from base fragment(s) [Å]

Base fragment(s) に対して、
4.5 Å 以内のフラグメントのみ
表示

Dist 4.5

Interaction energy by IFIE and PIEDA [kcal/mol]

|Total| > |ES| > |EX| >
|CT+mix| > |DI(MP2)| >

Fragment charge [e]

FCHARGE q_Mulliken
q_NPA q(l=>J)

Residue

Res # RES

Sort

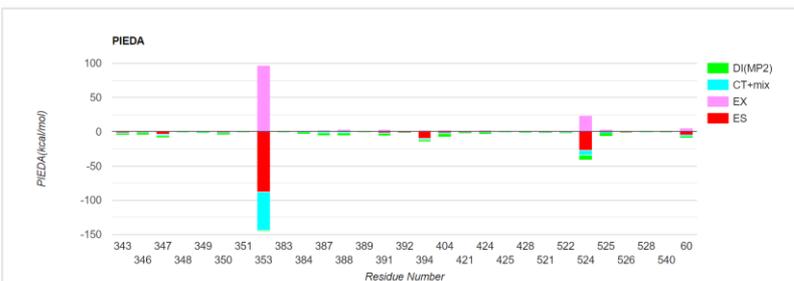
ascending

Graph Options

X Axis Label Residue Number
Y Axis Max Y Axis Min
Display ES EX CT+mix DI(MP2)

Submit

Interaction energy analysis for fragmet #237(D:600:EST)



frag_Num	Chain	Res #	RES	FCHARGE	q_Mulliken	q_NPA	DIST	Total	ES	EX	CT+mix	DI(MP2)	q(l=>J)
35	D	343	MET	0	0.032		2.873	-4.018	-1.566	0.465	-0.900	-2.016	0.009
38	D	346	LEU	0	-0.012		2.547	-3.320	-0.580	0.833	-0.568	-3.005	0.001
39	D	347	THR	0	0.039		2.583	-7.592	-3.937	1.175	-1.684	-3.146	-0.022
40	D	348	ASN	0	-0.026		3.937	-0.339	-0.173	0.002	-0.009	-0.159	0.000
41	D	349	LEU	0	-0.047		2.837	-0.778	0.611	0.185	-0.344	-1.231	0.002
42	D	350	ALA	0	0.022		2.500	-2.899	-0.700	1.177	-0.942	-2.435	0.000
43	D	351	ASP	-1	-0.873		3.506	0.038	0.193	0.051	0.061	-0.267	0.001
45	D	353	GLU	-1	-0.733		1.217	-47.354	-88.074	97.346	-55.884	-0.743	-0.172
75	D	383	TRP	0	0.039		3.932	-0.401	0.055	0.002	-0.037	-0.421	0.000
76	D	384	LEU	0	0.043		2.372	-2.017	-0.035	1.060	-0.446	-2.596	-0.003
79	D	387	LEU	0	-0.011		2.514	-3.526	-0.071	2.232	-1.507	-4.180	0.005
80	D	388	MET	0	-0.060		2.170	-2.760	0.810	2.151	-1.345	-4.376	-0.009
81	D	389	ILE	0	-0.014		3.827	0.145	0.323	0.005	0.021	-0.204	0.000
83	D	391	LEU	0	-0.007		2.150	-1.997	-1.287	3.468	-0.910	-3.269	0.000
84	D	392	VAL	0	-0.006		4.395	-0.897	-0.762	0.000	-0.026	-0.109	0.000
86	D	394	ARG	1	0.833		2.155	-11.760	-10.245	2.332	-1.566	-2.280	0.017
96	D	404	PHE	0	0.017		2.550	-5.448	-1.234	2.345	-1.297	-5.262	0.015
113	D	421	MET	0	-0.007		3.035	-1.800	-0.607	1.178	-0.464	-1.908	-0.001
116	D	424	ILE	0	0.021		2.089	-0.912	-0.388	2.354	-0.531	-2.347	0.002
117	D	425	PHE	0	0.026		3.866	-0.100	0.411	0.002	-0.048	-0.464	0.000
120	D	428	LEU	0	0.058		2.645	-0.960	0.003	0.305	-0.188	-1.080	0.000
213	D	521	GLY	0	0.029		2.775	-1.200	-0.487	0.430	-0.412	-0.731	0.000
214	D	522	MET	0	0.047		3.360	-1.919	-0.483	0.068	-0.512	-0.993	-0.006
216	D	524	HIS	0	-0.017		1.738	-17.446	-26.956	23.329	-7.389	-6.431	-0.051
217	D	525	LEU	0	0.021		2.392	-3.580	-0.396	3.580	-1.652	-5.112	0.005
218	D	526	TYR	0	0.058		3.304	-0.479	-0.690	0.190	0.607	-0.586	0.003
220	D	528	MET	0	-0.011		3.616	0.277	0.571	0.001	-0.046	-0.250	0.000
232	D	540	LEU	0	-0.013		4.360	-0.243	0.003	0.000	-0.014	-0.232	0.000
238	D	60	HOH	0	-0.017		2.013	-3.009	-4.446	5.711	-2.036	-2.237	0.012



FMODB: IFIE MAP解析/IFIE-diagram解析

FMODB ID: 5P4NP

Calculation Name: 1ERE-D-Xray7

Preferred Name: Estrogen receptor alpha

Target Type: SINGLE PROTEIN

Ligand Name: estradiol

ligand 3-letter code: EST

PDB ID: [1ERE](#)

Chain ID: D

ChEMBL ID: [CHEMBL206](#)

UniProt ID: [P03372](#)

Base Structure: X-ray

Registration Date: 2017-02-24

Reference:

DOI:

IFIE MAP

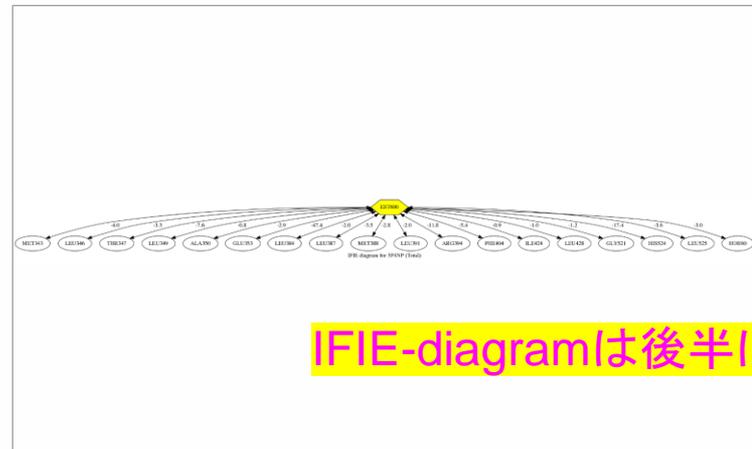
IFIE Diagram

Download Files

従来は[Download Files] からCPFファイルダウンロードしてBioStation Viewerに読み込ませていたが、、、



IFIE Diagram 5P4NP



IFIE-diagramは後半にデモ予定

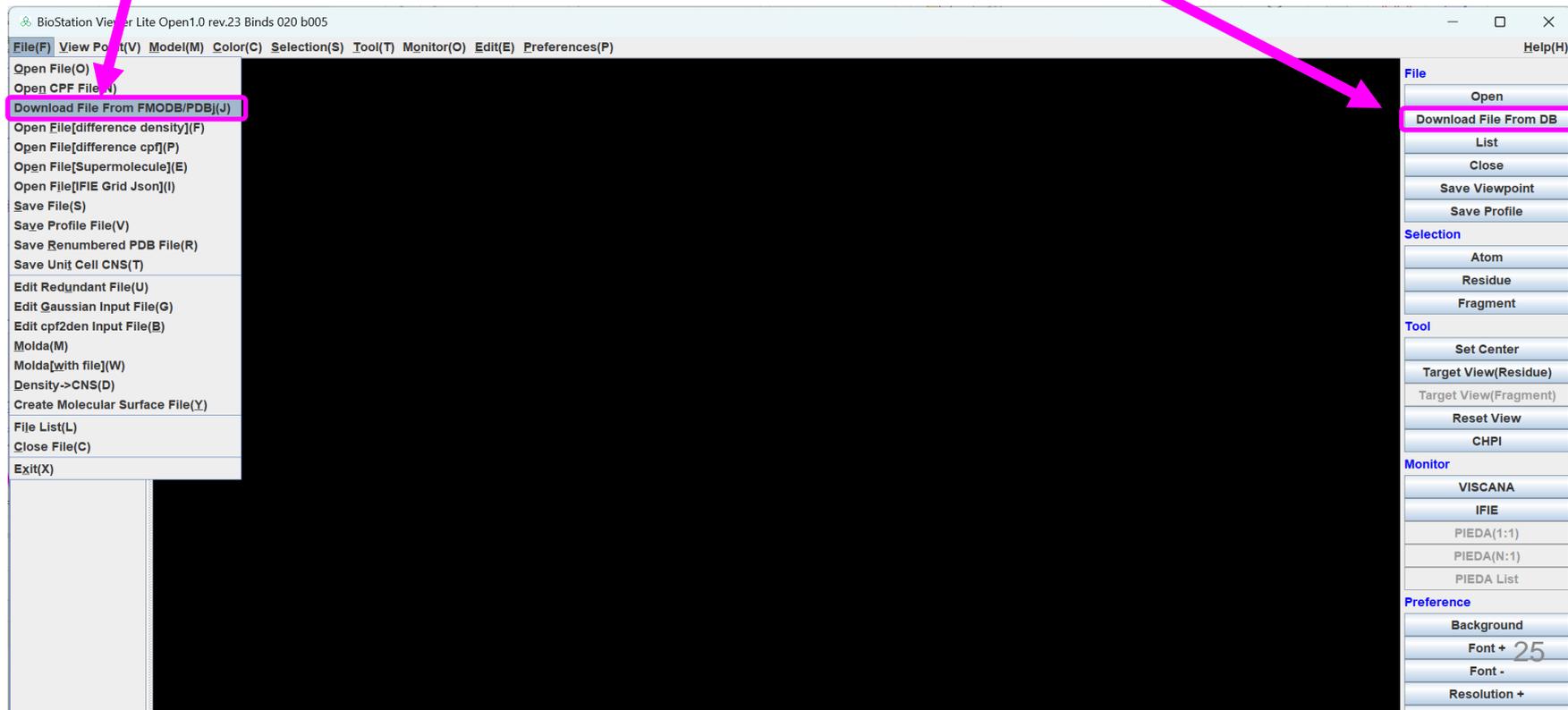


BioStation Viewer: FMOODBデータの読み込み(1)

FMO計算データ解析用専用GUIであるBioStation Viewerへ、
FMOODBデータ(CPFファイル/PDBファイル)の直接読み込み機能の実装

New!!

- ① BioStation Viewerを立ち上げる
- ② Download File From FMOODB/PDB(j)ウィンドウの立ち上げ
 - [File] -> [Download File From FMOODB/PDB(j)]
 - 右端のツールバーから[Download File From DB]をクリック





BioStation Viewer: FMODBデータの読み込み(3)

Download File From FMODB/PDBj

File(F)

Download

FMODB PDBj

FMODB ID 5P4NP

File Type CPF Format PDB Format

Range

None

Ignore Fragments

Fragments in Distance from Distance [Å]

Ignore Fragments by dimer value(CPF R23)

Save C:\Users\chiduru\Downloads\5P4NP.cpf File

Get Tree Download ⑦

Search from FMODB

Keyword estrogen

PDB ID

UniProt ID

Base Structure

Check All

X-ray NMR MD

ElectronMicroscopy Docking Others

Search

FMODB

Result 140 hits, (display only 100 results)

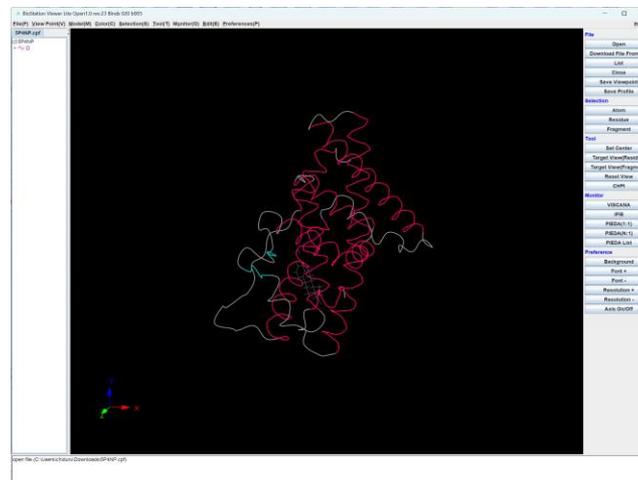
FMODB ID	PDB ID	Chain ID	Base Structure
5P4NP	1ERE*	D	X-ray
	1ERR*		
4PK3P	1GWR	B	X-ray
	1L2J*		
XVJ1X	1NDE	A	X-ray
	1QKM*		
	1RSK*		
	1SJO*		
	1U3Q*		
	1U3R*		
	1U3S*		
	1U9E*		
	1X76*		
	1X76*		

List View

- ⑦ [Download]ボタンをクリック
- ⑧ FMODBよりダウンロードしたcpfファイルの保存場所の確認 -> [OK]をクリック
※defaultはCドライブのDownloadsディレクトリ



- ⑨ BioStation ViewerにFMODBからダウンロードしたCPFファイルの読み込み



- ⑩ IFIE/PIDA解析 -> 本日チュートリアル2

目次

1. FMOODBの紹介と基本的な操作方法

- FMO法の概要
- FMOODBの概要
- FMOODBの基本操作・チュートリアル(1)
- FMOODBデータの検索機能・チュートリアル(2)
- FMOODBデータのWeb API機能

2. FMOODBデータ活用方法

- FMOODBデータの活用事例
- PIEDA解析(シングル/マルチフラグメント解析)
- Web APIを用いた相互作用解析
- IFIE-diagram解析

3. まとめ

チュートリアル(2):データの検索機能

- 検索サンプルを使って、ID検索、キーワード検索、BLAST検索、リガンド検索する。
- Advanced search機能を使って、各種条件で検索する。
 - 構造モデリング手法が一致するデータ
 - 同一文献データ



スライド左上にこのマークがあるスライドの内容は、チュートリアル操作に含まれます

FMODBのHPに関する参考資料 (2022年度FMODBチュートリアル資料)

1.<チュートリアル(1)資料>

[FMODBの紹介, 動的平均FMオリガンド-タンパク質間相互作用解析](#)



FMODB:検索機能

Advanced Search Download Manual

FMODB FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2023-09-27
All entries: 40810
Number of unique PDB entries: 8548

Information ID Search Keyword Search Blast Search Ligand Structure Search

Base Structure
 Check all
 X-ray NMR MD
 ElectronMicroscopy Docking Others

1ERE ID Search Advanced Search

タブで検索機能移動

- ID検索
- Keyword検索
- Blast検索
- 化合物構造検索

Category

- [COVID-19\(2516\)](#)
- [X-ray All Entries\(26945\)](#)
- [NMR All Entries\(104\)](#)
- [MD All Entries\(13333\)](#)
- [ElectronMicroscopy All Entries\(86\)](#)
- [Docking All Entries\(148\)](#)
- [Others All Entries\(194\)](#)



Search Sample

Keyword Search: COVID-19 [Set Value Of Input](#)
PDB ID Search: 1ERE [Set Value Of Input](#)
FMODB ID Search: 5P4NP [Set Value Of Input](#)
UniProt ID Search: P03372 [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Target): Estrogen receptor alpha [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Ligand): NHI [Set Value Of Input](#)
Blast Search: Sequence of 3RIN / E-Value Cutoff E-148 [Set Value Of Input](#)



FMODB:検索サンプル

English 日本語

[Advanced Search](#) [Restful API](#) [Download](#) [Manual](#)

FMODB FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2024-07-23
All entries: 37450
Number of unique PDB entries: 7783

Information ID Search Keyword Search Blast Search Ligand Structure Search

Base Structure
 Check all
 X-ray NMR MD
 ElectronMicroscopy Docking Others

1ERE

Category

- COVID-19
- X-ray All Entries
- [NMR All Entries\(104\)](#)
- [MD All Entries\(12292\)](#)
- [ElectronMicroscopy All Entries\(52\)](#)
- [Docking All Entries\(30\)](#)
- [Others All Entries\(57\)](#)

Search Sample

Keyword Search: COVID-19 [Set Value Of Input](#)
PDB ID Search: 1ERE [Set Value Of Input](#)
FMODB ID Search: 5P4NP [Set Value Of Input](#)
UniProt ID Search: P03372 [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Target): Estrogen receptor alpha [Set Value Of Input](#)
Keyword Search(Ligand): NHI [Set Value Of Input](#)
Blast Search: Sequence of 3RIN / E-Value Cutoff E-148 [Set Value Of Input](#)

検索事例サンプル
各リンクを押すと検索事例
が検索ウィンドウに反映



FMODB: ID検索、Keyword検索

ID検索

Advanced Search Download Manual

FMODB FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2023-09-27
All entries: 40810
Number of unique PDB entries: 8548

Information **ID Search** Keyword Search Blast Search Ligand Structure Search

Base Structure
 Check all
 X-ray NMR MD
 Electron Microscopy Docking Others

1ERE ID Search Advanced Search

- FMODB ID
- PDB ID
- UniProt ID

Keyword検索

Advanced Search Download Manual

FMODB FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2023-09-27
All entries: 40810
Number of unique PDB entries: 8548

Information ID Search **Keyword Search** Blast Search Ligand Structure Search

Base Structure
 Check all
 X-ray NMR MD
 Electron Microscopy Docking Others

Estrogen receptor alpha Keyword Search Advanced Search

- タンパク質名
- 化合物名



FMODB:BLAST検索機能

FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
 Last updated: 2024-07-23
 All entries: 37450
 Number of unique PDB entries: 7783

BLAST検索

Information ID Search Keyword Search **BLAST Search** Ligand Structure Search

Base Structure
 Check all
 X-ray NMR MD
 ElectronMicroscopy Docking Others

PTFYRQELNKTIEWEPERYQNLSPVSGGAYGSVCAAFDTK
 TGLRVAVKKLSRPFQSTIHKARTYRELRLKMKHENVIG
 LLDVFTPARSL EEFNDVYLVTHLMGADLNNIVKCKQLTDD
 HVQFLIYQILRGEKYIHSADTIHRDLKPSNLAVNEDCELK
 ILDFGLARHTDDEMTGYVATRWYRAPEIMLNNMHHYNGTVD

E-148 **BLAST検索閾値**

配列(fasta)情報

Criteria for Blast Search
 Sequence: PTFYRQELNK ... Cut-Off: E-148
 Base Structure: X-ray NMR MD ElectronMicroscopy Docking Others

Summary for all items(csv file) Summary for checked items(csv files)
 Calculation Data(zip files; checked items up to 10 data) CheckPoint File(checked items up to 10 data) **Download**

Search Result: 188 Hits Currently showing: 1 - 50 Page: 1 / 4 Next > Displaying results: 10 50 100

Sort Display only checked items **Sort Results**

check / uncheck all items on this page

X17ZX
 FMODB ID: X17ZX
 Calculation Name: 1BL6-A-Xray9
 Preferred Name: MAP kinase p38 alpha
 PDB ID: 1BL6
 Chain ID: A
 UniProt ID: Q16539
 ChEMBL ID: CHEMBL260
 Base Structure: X-ray
 Registration Date: 2017-05-08
 Reference:
 E-value 0.0
 Score 722
 Modeling method
 Optimization: MOE:MMFF94x
 Restraint: OptH
 Procedure: Auto-FMO protocol ver. 1.20170327
 FMO calculation
 FMO method: FMO2-MP2/6-31G(d)
 FMO2-HF: Total energy (hartree): -139907.583144
 FMO2-MP2: Total energy (hartree): -140316.821554
 Ligand binding energy

IFIE [kcal/mol]	PIEDA [kcal/mol]			Charge transfer value [e]	
IFIE SUM	ES	EX	CT+mix	Dl(MP2)	q(l=>j)
-86.687	-57.777	43.846	-23.012	-49.749	-0.101

Hit Ligands
 Number of ligands: 0

P55ZP

Ligand Interaction

BLAST検索閾値を緩めれば
スーパーファミリーなどもヒット



FMODB:Ligand構造検索機能

ID検索、キーワード検索、BLAST検索に加えて、Ligand構造検索機能を実装を完了。

FMODB: The database of quantum mechanical data
Last updated: 2023-09-27
All entries: 40810
Number of unique PDB entries: 8548

Ligand構造検索

Information ID Search Keyword Search Blast Search **Ligand Structure Search**

Base Structure
 Check all
 X-ray NMR MD
 ElectronMicroscopy Docking Others

Method: **Substructure**
Similarity (MACCS 166 Keys)
AsIs

- Substructure検索
- Similarity検索
- AsIs検索



検索結果

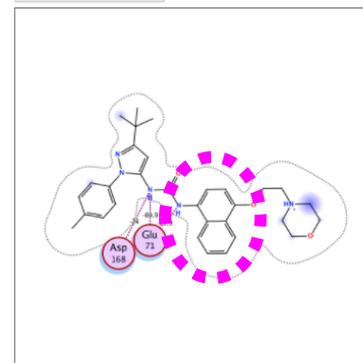
Search Result: 40 Hits

Currently showing: 1 - 40

[P4JNP](#)

FMODB ID: P4JNP
Calculation Name: 1KV2-A-Xray9
Preferred Name:
PDB ID: [1KV2](#)
Chain ID: A
UniProt ID: [Q16539](#)
Base Structure: X-ray
Registration Date: 2017-05-08
Reference:
Modeling method
Optimization: MOE:MMFF94x
Restraint: OptH
Procedure: Auto-FMO protocol ver. 1.20170327
FMO calculation
FMO method: FMO2-MP2/6-31G(d)
FMO2-HF: Total energy (hartree): -140644.1001
FMO2-MP2: Total energy (hartree): -141056.407694

Ligand Interaction



Ligand: B96

Ligand binding energy

IFIE [kcal/mol]	PIEDA [kcal/mol]				Charge transfer value [e]
IFIE SUM	ES	EX	CT+mix	DI(MP2)	q(I=>J)
-235.386	-198.971	118.829	-37.394	-117.848	0.087

Hit Ligands

Number of ligands: 1

Ligand SMILES : Cc1ccc(-n2nc(C(C)

(C)C)cc2NC(=O)Nc2ccc(OCC[NH+]3CCOCC3)c3ccccc23)cc1



FMODB:Advanced検索機能

2022年度までは、分子構造の基本情報のみ検索可能であったが、Advanced検索機能により、構造モデリング、FMO計算など複数条件で検索可能

Advanced Search

Basic

FMODB ID: 5P4NP, 4PK3P, ... PDB ID: 1ERE, 1BVE, ...

UniProt ID: P03372 CHEMBL ID: CHEMBL4630 Calculation Name: 1ERE-D-Xray7

All X-ray NMR MD ElectronMicroscopy

Docking Others

Preferred Name: Estrogen receptor alpha Target Type: Choose... Chain ID: A

With Ligand Ligand Name: estradiol Ligand Code: NHI

Reference: Projece Name: DOI: Registration Start Date: Registration End Date:

Modeling method

Optimization: MOE:Amber10:EHT Restraint: OptH Protonation: MOE:Protonate 3D Complement: MOE:Structure Prepar

Water: All crystal waters in PDB. Procedure: Auto-FMO protocol ver. 1

FMO calculation

FMO method: FMO2-MP2 / 6-31G(d) Fragmentation: Auto

Software: Choose...

Search

各エントリー詳細ページ登録情報

FMODB ID: 5P4NP
Calculation Name: 1ERE-D-Xray7
Preferred Name: Estrogen receptor alpha
Target Type: SINGLE PROTEIN
Ligand Name: estradiol
ligand 3-letter code: EST
PDB ID: 1ERE
Chain ID: D
CHEMBL ID:
UniProt ID: P03372
Base Structure: X-ray
Registration Date: 2017-02-24
Reference:
DOI:
Archive: None

[IFIE MAP](#)
[IFIE Diagram](#)
[Download Files](#)

Modeling method

Optimization	MOE:Amber10:EHT
Restraint	OptH
Protonation	MOE:Protonate 3D
Complement	BioStation/Viewer/StructureComplementation (agonist template: 1A52)
Water	A bridging water among Glu353, Arg394 and ligand.
Procedure	Manual calculation

FMO calculation

FMO method	FMO2-MP2/6-31G(d)
Fragmentation	Auto
Number of fragment	238
LigandCharge	EST=0
Software	MZUHO/ABINIT-MP 4.0(SMP)

Total energy (hartree)

FM02-HF: Electronic energy	-3151388.208186
FM02-HF: Nuclear repulsion	3053174.845449
FM02-HF: Total energy	-98213.362736
FM02-MP2: Total energy	-98490.505804

分子構造の基本情報

構造モデリング情報

FMO計算情報



FMODB:Advanced検索項目(1)

Basic search items

Search entry	Description	
FMODB ID	Unique ID assigned to one calculation data in FMODB.	
PDB ID	Identifiers used in the RCSB Protein Data Bank (multiple IDs possible).	
UniProt ID	Identifier used in protein databases (multiple IDs possible).	
ChEMBL ID	Identifiers used in ChEMBL (Chemical Biology Database).	
Calculation Name	Identifier denoting data attributes in FMODB. e.g., [PDB ID] - [Chain] - [Structure type][Model number]	
Structure	Structure type, e.g., 'X-ray', 'NMR', 'MD', 'ElectronMicroscopy', 'Docking', 'Others'	構造情報
Preferred Name	Preferred Name for Protein Targets.	
Target Type	Target category, e.g., 'SINGLE Protein'.	
Chain ID	Labels to identify protein or polypeptide chains, e.g., 'A', 'B'.	
With Ligand	Select whether the data is for a structure in which a ligand is bound.	
Ligand Name	Ligand name.	
Ligand Code	3-letter code for the ligand.	
Reference	Information on papers related to data.	FMODBエントリーに対する論文情報
Project Name	Project name allocated during registration in FMODB.	関連FMODB登録データID
DOI	DOI information of papers related to data.	FMODBエントリーに対する論文のDOI
Registration Date	Data registration date.	データ登録日



FMODB:Advanced検索項目(2)

Basic search items

Search entry	Description
Optimization	Optimization conditions for structure in FMO calculation, e.g., 'MOE:Amber10:EHT', 'AMBER15:AMBER14SB'. 構造最適化手法
Restraint	Structural constraints in FMO calculations, e.g., 'OptH', 'OptHSide', 'OptAll'. 構造最適化拘束条件
Protonation	Hydrogen addition conditions for the structure in FMO calculations, e.g., 'MOE:Protonate 3D', 'MOE:AddH', 'PROPKA'. 水素付加手法
Complement	Complementary conditions for structure in FMO calculation, e.g., 'MOE:Structure Preparation', 'MOE:Homology Modeling', 'SWISS Model'. 欠損原子の構造補完手法
Water	Treatment of water in FMO calculations, e.g., 'All crystal waters in PDB', 'Shell water (8 angstrom) from solute'. 水分子の処理
Procedure	Version of Auto-FMO protocol developed by our team. Auto-FMOプロトコルデータの抽出

Search items for FMO calculation

Search entry	Description
FMO method	Calculation level of FMO calculation. , e.g., 'FMO2-MP2/6-31(G)*', 'FMO2-MP2/6-31(G)d'.
Fragmentation	Fragment division method in FMO calculation, e.g., 'Auto', 'Manual', 'Hybrid'.
Software	Software used for FMO calculation, e.g., 'ABINIT-MP', 'MIZUHO/ABINIT-MP', 'GAMESS'.



Advanced search機能: 各種条件で検索

Advanced Search

Basic

FMO DB ID: 5P4NP,4PK3P,... PDB ID: 1ERE,1BVE,...

UniProt ID: P03372 ChEMBL ID: CHEMBL4630 Calculation Name: 1ERE-D-Xray7

All X-ray NMR Docking Other

Preferred Name: Estrogen receptor alpha Target Type: Choose...

With Ligand Ligand Name: estradiol Ligand Code: NHI

Reference: DOI:

Modeling method

Optimization: MOE:Amber10:EHT Restraint: OptH Protonation: MOE:Protonate 3D Complement: Choose...

Water: Choose... Procedure: Auto-FMO protocol ver. 1

FMO calculation

FMO method: FMO2-MP2 / 6-31G(d) Fragmentation: Choose...

Software: Choose...

基本登録条件

Base structure: X-ray
With Ligand: On

構造モデリング条件

Optimization: Amber10:EHT
Restrain: OptH
Protonation: MOE:Protonate3D
Procedure: Auto-FMO protocol ver.1

FMO計算条件

FMO method: FMO2-MP2/6-31G*

Search

検索結果: 408件ヒット

Criteria for

Base Structure: X-ray NMR MD ElectronMicroscopy Docking

Summary for all items(csv file) Summary for checked items(csv files)
 Calculation Data(zip files; checked items up to 10 data) CheckPoint File(checked items up to 10)

Search Result: 408 Hits Currently showing: 1 - 50 Page: 1 / 9 Next > Displaying results:

Sort Display only checked items [Sort Results](#)

check / uncheck all items on this page

[XR18P](#)

FMO DB ID: XR18P
Calculation Name: 2C6E-A-Xray8
Preferred Name: Serine/threonine-protein kinase Aurora-A
Target type: SINGLE PROTEIN
PDB ID: [2C6E](#)
Chain ID: A
UniProt ID: [O14965](#)
ChEMBL ID: [CHEMBL4722](#)
Base Structure: [X-ray](#)
Registration Date: 2017-03-09
Reference:
Modeling method
Optimization: [MOE:Amber10:EHT](#)
Restraint: [OptH](#)
Procedure: [Auto-FMO protocol ver. 1.20160629](#)
FMO calculation
FMO method: [FMO2-MP2/6-31G\(d\)](#)
FMO2-HF: Total energy (hartree): -106004.536245
FMO2-MP2: Total energy (hartree): -106318.22896

Ligand binding energy

IFIE [kcal/mol]	PIEDA [kcal/mol]				Charge transfer value [e]
IFIE SUM	ES	EX	CT+mix	DI(MP2)	q(I=>J)
-127.283	-69.812	61.673	-35.202	-83.945	0.006

Ligand Interaction:
Ligand: HPM



Advanced search機能：文献情報検索

Advanced Search



Basic

FMO DB ID: 5P4NP,4PK3P,...

PDB ID: 1ERE,1BVE,...

UniProt ID: P03372

ChEMBL ID: CHEMBL4630

Calculation Name: 1ERE-D-Xray7

All X-ray NMR MD ElectronMicroscopy Docking Others

Preferred Name: Estrogen receptor alpha

Target Type: Choose...

Chain ID: A

With Ligand

Ligand Name: estradiol

Ligand Code: NHI

Reference:

Projece Name:

DOI: 10.1021/acs.jcim.1c00694

Registration Start Date:

Registration End Date:

Modeling method

FMO calculation

基本登録条件
DOI: 10.1021/acs.jcim.1c00694

Search

検索結果：**17**件ヒット

Criteria for

Base Structure: X-ray NMR MD ElectronMicroscopy Docking Others

Summary for all items(csv file) Summary for checked items(csv files)

Calculation Data(zip files; checked items up to 10 data) CheckPoint File(checked items up to 10 data) **Download**

Search Result: 17 Hits Currently showing: 1 - 17 Page: 1 / 1 Displaying results: 10 50 100

Sort Display only checked items **Sort Results**

check / uncheck all items on this page

JM9Y9

FMO DB ID: JM9Y9
Calculation Name: 6W4H-AB-Xray103
PDB ID: [6W4H](#)
Chain ID: AB
UniProt ID: [P0DTD1](#)
Base Structure: X-ray
Registration Date: 2020-04-16
Reference: K. Fukuzawa, K. Kato, C. Watanabe et al., Special Features of COVID-19 in the FMO DB: Fragment Molecular Orbital Calculations and Interaction Energy Analysis of SARS-CoV-2-Related Proteins. J. Chem. Inf. Model. 2021, 61, 9, 4594-4612.
DOI: [10.1021/acs.jcim.1c00694](#)

Modeling method
Optimization: MOE:Amber10:EHT
Restraint: OptHLSideSolv
Procedure: Manual calculation

FMO calculation
FMO method: FMO2-MP2/6-31G(d)
FMO2-HF: Total energy (hartree): -201125.363025
FMO2-MP2: Total energy (hartree): -201681.023606

Ligand binding energy

IFIE [kcal/mol]	PIEDA [kcal/mol]				Charge transfer value [e]
	ES	EX	CT+mix	DI(MP2)	q(I=>J)
-468.038	-432.672	181.895	-94.931	-122.326	0.300

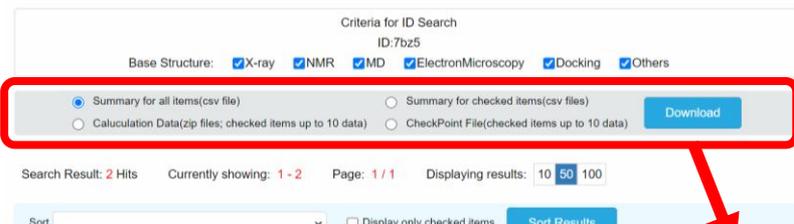
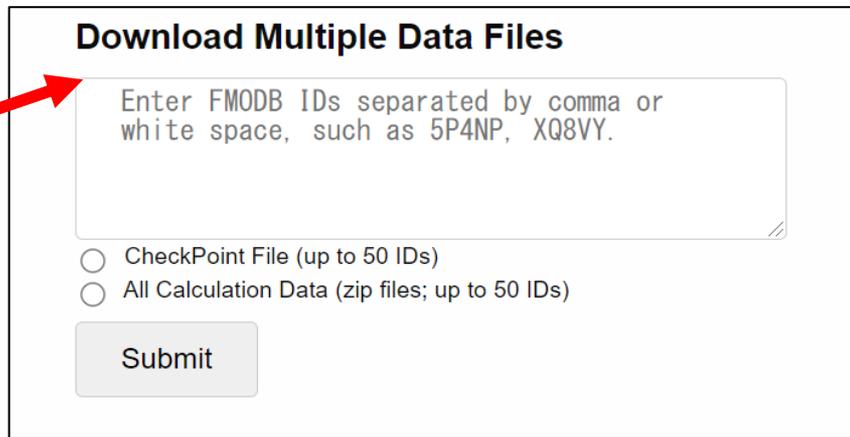
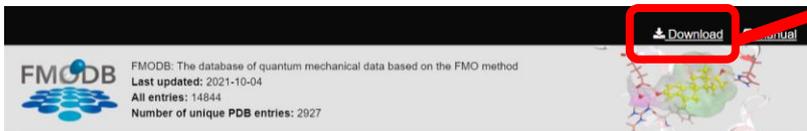
Ligand Interaction

Ligand: SAM

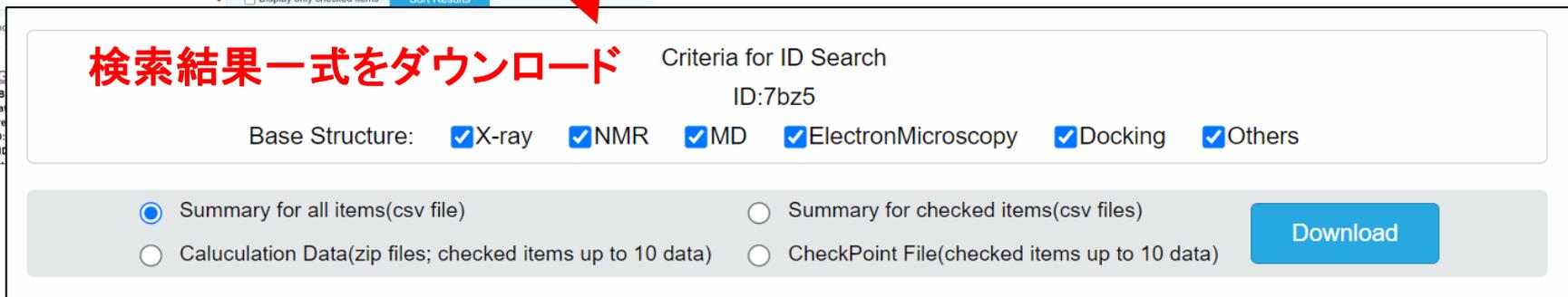
FMODB:データのダウンロード機能

検索結果一式や、FMODB IDからデータのダウンロードが可能となった。

FMODB ID指定によるダウンロードが可能！



検索結果一式をダウンロード



- Summary(*. csv)ファイルには検索されたエントリーデータに対する FMODB ID, PDB ID, Total energy, Ligand binding energy等が記載
- Calculation Data(*.zip)には、オリジナルのFMO計算データが格納
- Check Point File(*.zip)には、FMODB IDにファイル名が書き換えられたCPFファイルが格納

FMODBのHPIに関する参考資料 (2022年度FMODBチュートリアル資料)

1.<チュートリアル(1)資料> [スライド20-26をご参照ください。](#)

[FMODBの紹介, 動的平均FMOリガンド-タンパク質間相互作用解析](#)

目次

1. FMODBの紹介と基本的な操作方法

- FMO法の概要
- FMODBの概要
- FMODBの基本操作・チュートリアル(1)
- FMODBデータの検索機能・チュートリアル(2)
- FMODBデータのWeb API機能

2. FMODBデータ活用方法

- FMODBデータの活用事例
- PIEDA解析(シングル/マルチフラグメント解析)
- Web APIを用いた相互作用解析
- IFIE-diagram解析

3. まとめ

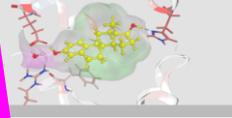
FMODB: Web API機能

<https://drugdesign.riken.jp/FMODB>

Advanced Search Restful API Download Manual



FMODB: The database of quantum mechanical data based on the FMO method
Last updated: 2024-07-23
All entries: 37450
Number of unique PDB entries: 7783



実装済みのWebAPIを用いて
FMODBデータの抽出が可能

<https://drugdesign.riken.jp/redoc/index.html>

FMODB RESTful API

Search...

- Search by Identifier
- Get Registered Information
- Fragment Information
- FMO Calculation Results
- FMO Calculation Details
- PIEDA Data
- Download
- Statistics

FMODB RESTful API (v1.0.0 - 2024-10-28)

Download OpenAPI specification: [Download](#)

API Support: <https://drugdesign.riken.jp/FMODB/>
URL: <https://drugdesign.riken.jp/pub/qcontact.html>

The FMODB RESTful API provides seamless access to a comprehensive database of data registered within FMODB. Initially developed as a beta version, it was officially released on October 28, 2024. The API will be continuously updated with new features to enhance user experience. Visit <https://drugdesign.riken.jp/FMODB/> for more details or contact us at <https://drugdesign.riken.jp/pub/qcontact.html>.

Search by Identifier

Endpoints to search using specific identifiers.

Check FMODB ID existence

Checks if the specified FMODB ID exists in the database and returns "OK" if it is found, or "NG" if it is not.

Example URL: <https://drugdesign.riken.jp/fcgl-bin/fmodbrest/search/fmodbid/5P4NF>

PATH PARAMETERS

`fmodbid` string
required The FMODB ID to check (e.g., `5P4NF`)

Responses

New!!

- FMODB登録データの検索
- フラグメント情報
- PIEDAデータ
- データダウンロード
- 解析

GET /search/fmodbid/{fmodbid}

Response samples

200 500

Content type
application/json

```
{
  "property1": "string",
  "property2": "string"
}
```

FMODB: Web APIによるFMODB登録データ検索

PDB ID, UniProt ID, FMODB IDなどに基づくFMODB登録データ検索

Search...
Search by Identifier >
Get Registered Information >
Fragment Information >
FMO Calculation Results >
Retrieve FMO calculation results by IDs (selected)

Retrieve FMO calculation results by IDs
Retrieves result page information for FMO calculation data based on various IDs such as PDB_ID, FMODB_ID, IFIE_ID, UniProt_ID, or CalculationName. IDs can be separated by commas to perform OR searches.
Example URL: <https://drugdesign.riken.jp/cgi-bin/fmodbrest/search/result/pdbid/1ERE>
Example URL: <https://drugdesign.riken.jp/cgi-bin/fmodbrest/search/result/fmodbid/5P4NP,XQ8VY>

PATH PARAMS
idType required
Example: fmodbid, pdbid, uniprotid, calculationname
Type of ID (e.g. pdbid, fmodbid, ifieid, uniprotid, calculationname)
idValue required
Example: 5P4NP, 1ERE, P03372, 1ERE-D-Xray7
ID value

Responses
> 200
OK
> 500
Internal Server Error

Web APIのサンプル例

Web APIの戻り値

json形式でデータが表示

```
GET /search/result/{idType}/{idValue}
Response samples
200 500
Content type
application/json
Copy Expand all Collapse all
{"Count": 0,
 "Lists": [
   {
     "Additional_Binding_Energy": {},
     "BaseStructure": "string",
     "CalculationName": "string",
     "ChEMBLId": "string",
     "ChainId": "string",
     "Complement": "string",
     "Fmo2HfTotalEnergy": "string",
     "Fmo2Mp2TotalEnergy": "string",
     "FmoMethod": "string",
     "Fmodbid": "string",
     "Fragmentation": "string",
     "Ifield": "string",
     "LigandFragmentNumber": "string",
     "MdTime": 0,
     "MdTimeUnit": "string",
     "Model": "string",
     "Optimization": "string",
     "Pdbid": "string",
     "PiedaSumCtMix": "string",
     "PiedaSumDIp2": "string",
     "PiedaSumEs": "string",
     "PiedaSumEx": "string",
     "PiedaSumQIj": "string",
     "Preferred Name": "string",
     "Procedure": "string",
     "Receptor_apo": "string",
     "Reference": "string",
     "ReferenceDoi": "string",
     "Restraint": "string",
     "SumTotal": "string",
     "UniProtId": "string",
     "UniProt_ChEMBL_Pairs": "string"
   }
 ]
 }
```

Example URL:

<https://drugdesign.riken.jp/cgi-bin/fmodbrest/search/result/pdbid/1ERE>

```
{
  "Count": 6,
  "Lists": [
    {
      "Ifield": "F000001",
      "Fmodbid": "5P4NP",
      "CalculationName": "1ERE-D-Xray7",
      "Preferred Name": "Estrogen receptor alpha",
      "Pdbid": "1ERE",
      "ChainId": "D",
      "UniProtId": "P03372",
      "ChEMBLId": "CHEMBL206",
      "UniProt_ChEMBL_Pairs": "P03372:CHEMBL206",
      "BaseStructure": "X-ray",
      "Receptor_apo": "0",
      "MdTime": 0,
      "MdTimeUnit": "",
      "Model": "",
      "RegistrationDate": "2017-02-24",
      "Reference": "",
      "ReferenceDoi": "",
      "Optimization": "MOE-Amber10:EHT",
      "Restraint": "Ooth",
      "Complement": "BigStationViewer:StructureComplementation (agonist temp",
      "Fragmentation": "Auto",
      "Procedure": "d",
      "FmoMethod": "FM02-MP2/6-31G(d)",
      "Fmo2HfTotalEnergy": "#-98213.3627364836",
      "Fmo2Mp2TotalEnergy": "-98490.5058038801",
      "LigandFragmentNumber": "237",
      "SumTotal": "-127.936",
      "PiedaSumEs": "-141.441",
      "PiedaSumEx": "151.973",
      "PiedaSumCtMix": "-80.080",
      "PiedaSumDIp2": "-58.392",
      "PiedaSumQIj": "0.192",
      "Additional_Binding_Energy": {}
    },
    {
      "Ifield": "F000483",
      "Fmodbid": "XQ8VY",
      "CalculationName": "1ERE-A-Xray1",
      "Preferred Name": "Estrogen receptor alpha",
      "Pdbid": "1ERE",
      "ChainId": "A",
      "UniProtId": "P03372",
      "ChEMBLId": "CHEMBL206",
      "UniProt_ChEMBL_Pairs": "P03372:CHEMBL206",
      "BaseStructure": "X-ray",
      "Receptor_apo": "0",
      "MdTime": 0,
      "MdTimeUnit": "",
      "Model": "",
      "RegistrationDate": "2017-02-24",
      "Reference": "",
      "ReferenceDoi": "",
      "Optimization": "MOE-Amber10:EHT",
      "Restraint": "Ooth",
      "Complement": "BigStationViewer:StructureComplementation (agonist temp",
      "Fragmentation": "Auto",
      "Procedure": "d",
      "FmoMethod": "FM02-MP2/6-31G(d)",
      "Fmo2HfTotalEnergy": "#-98213.3627364836",
      "Fmo2Mp2TotalEnergy": "-98490.5058038801",
      "LigandFragmentNumber": "237",
      "SumTotal": "-127.936",
      "PiedaSumEs": "-141.441",
      "PiedaSumEx": "151.973",
      "PiedaSumCtMix": "-80.080",
      "PiedaSumDIp2": "-58.392",
      "PiedaSumQIj": "0.192",
      "Additional_Binding_Energy": {}
    }
  ]
 }
```


目次

1. FMODBの紹介と基本的な操作方法

- FMO法の概要
- FMODBの概要
- FMODBの基本操作・チュートリアル(1)
- FMODBデータの検索機能・チュートリアル(2)
- FMODBデータのWeb API機能

2. FMODBデータ活用方法

- FMODBデータの活用事例
- PIEDA解析(シングル/マルチフラグメント解析)
- Web APIを用いた相互作用解析
- IFIE-diagram解析

3. まとめ

FMODBデータの活用事例

【過去のFMODBチュートリアル】

<https://drugdesign.riken.jp/pub/CBI2021tut/>

<https://drugdesign.riken.jp/pub/CBI2022tut/>

<https://drugdesign.riken.jp/pub/CBI2023tut/>

分子認識機構等の解析(Webインターフェイス)

活用事例1: SARS-CoV-2 spike proteinと抗体間のHot spot解析

活用事例2: SARS-CoV-2 spike proteinと抗体間の結合能予測

活用事例3: SARS-CoV-2 RdRp-RNA-RemdesivirのIFIE-diagram

活用事例4: 動的FMOデータのIFIE解析

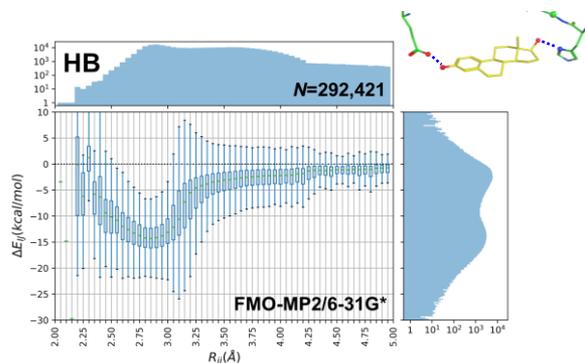
FMODBデータの統計解析、及びAI予測(データダウンロード)

活用事例5: 水素結合相互作用の統計解析

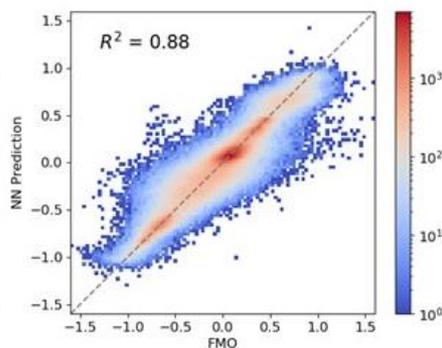
活用事例6: FMO原子電荷予測AIの構築

活用事例7: SARS-CoV-2 main proteaseのVISCANA解析

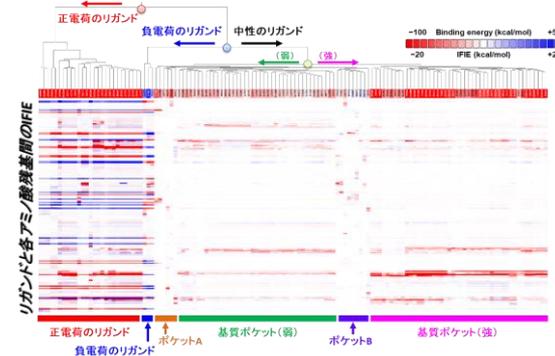
水素結合相互作用の統計解析



FMO原子電荷予測AI



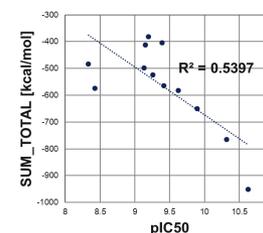
VISCANA解析



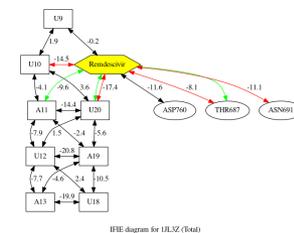
IFIE/PIEDA解析



結合能予測

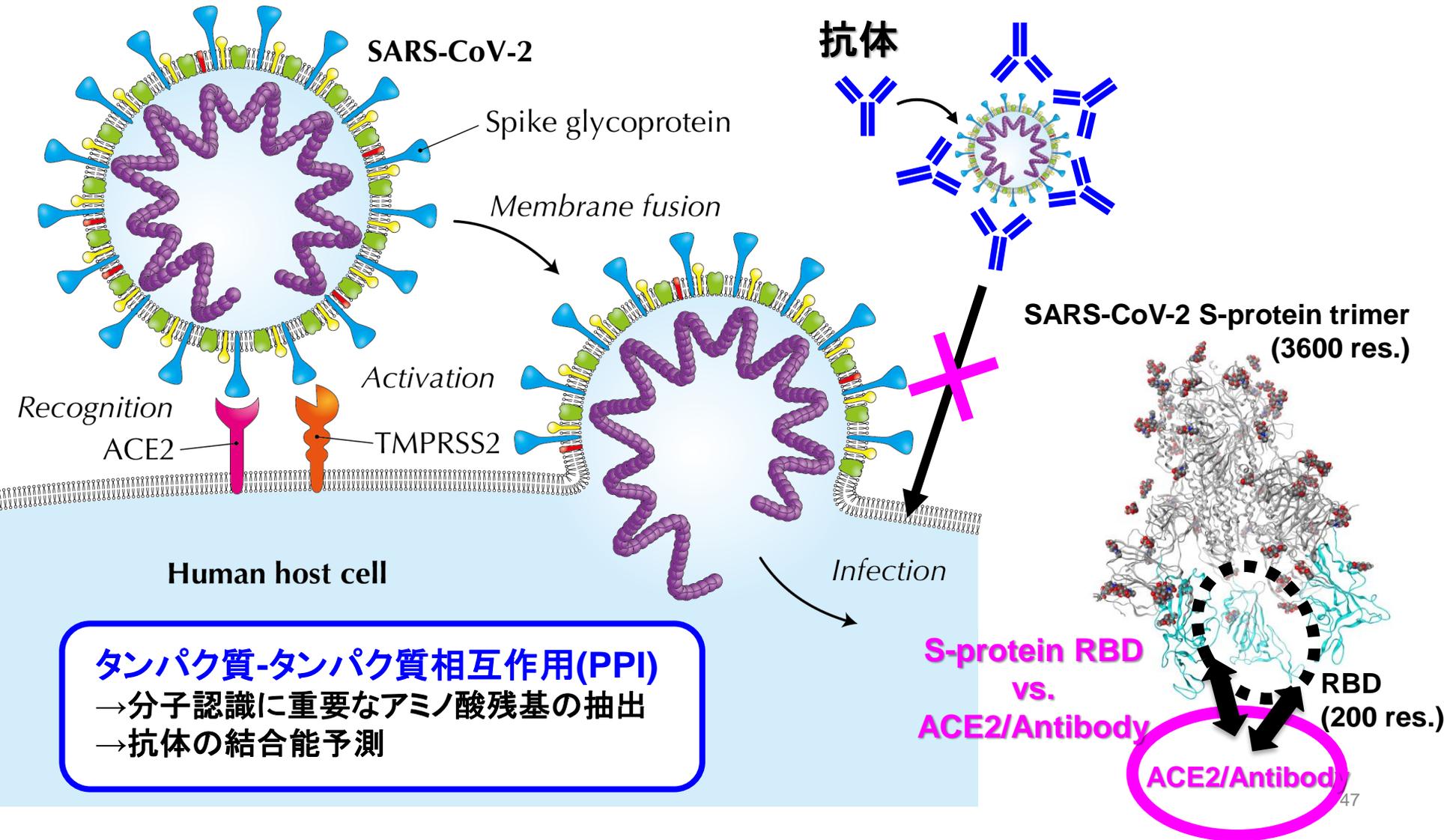


IFIE-diagram



SARS-CoV-2 spike proteinを介した感染メカニズム

Watanabe C et al., Chem. Sci., 12, 4722-4739, 2021.



タンパク質-タンパク質相互作用(PPI)

→分子認識に重要なアミノ酸残基の抽出

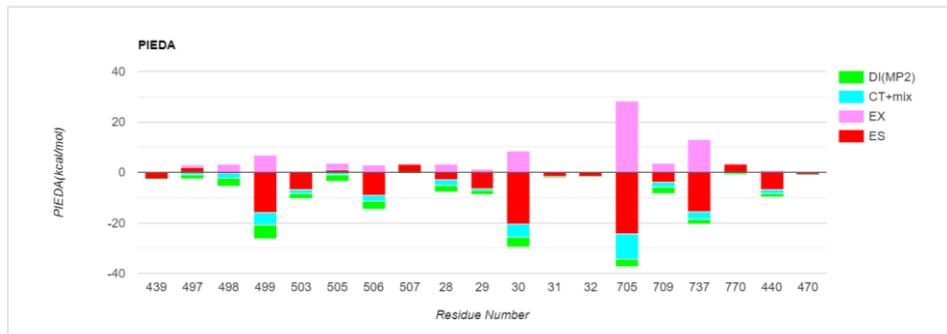
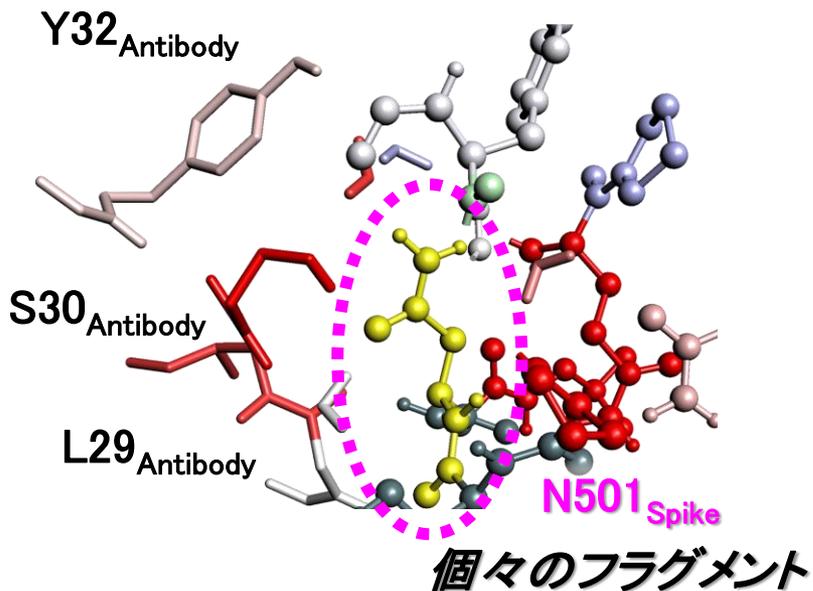
→抗体の結合能予測

活用事例1 : SARS-CoV-2 spike proteinと抗体間のPIEDA

題材 : Watanabe C et al., Chem. Sci., 12, 4722-4739, 2021.

FMODB ID: Q86GY
PDB ID: 7BZ5

リガンド分割データや、PPI分子系などの複数フラグメント単位で解析したいデータについてマルチフラグメント(N:1)のIFIE解析が可能となった。



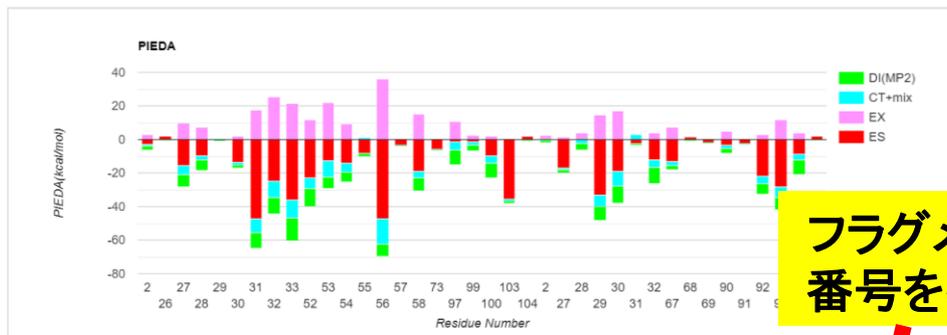
Base fragment(s) of PIEDA/IFIE Single fragment Multi fragments

165(A:501:ASN)

Fragment list

:GE : 0 / q_Mulliken : -0.015 / q_NPA : 0.026

シングルフラグメント



フラグメント
番号を指定

Each amino acid
of antibody (1)

SARS-CoV-2
Spike protein
(N: 1-191,622)
タンパク質全体

Base fragment(s) of PIEDA/IFIE Single fragment Multi fragments

--Fragment list--

1-191,622

Charge [e] FCHAF

マルチフラグメント

活用事例2: SARS-CoV-2 spike proteinと抗体間の結合能予測

K. Watanabe et al, J. Phys. Chem. Lett., 12, 4059-4066, 2021.

- ① カンマ区切りで使いたいBinding EnergyのFMO DB IDを入れてGoogle Chrome等のアドレスバーに代入

<http://drugdesign.riken.jp/fcgi-bin/fmodbrest/depositor/data/manual/ligand/GQ1L1,1JR2Z,9Y3N2,8JL8Y,N34VQ,JM169,3N63L,JM5M9,V2M81,MM56Z,7J93K,LL1M9>

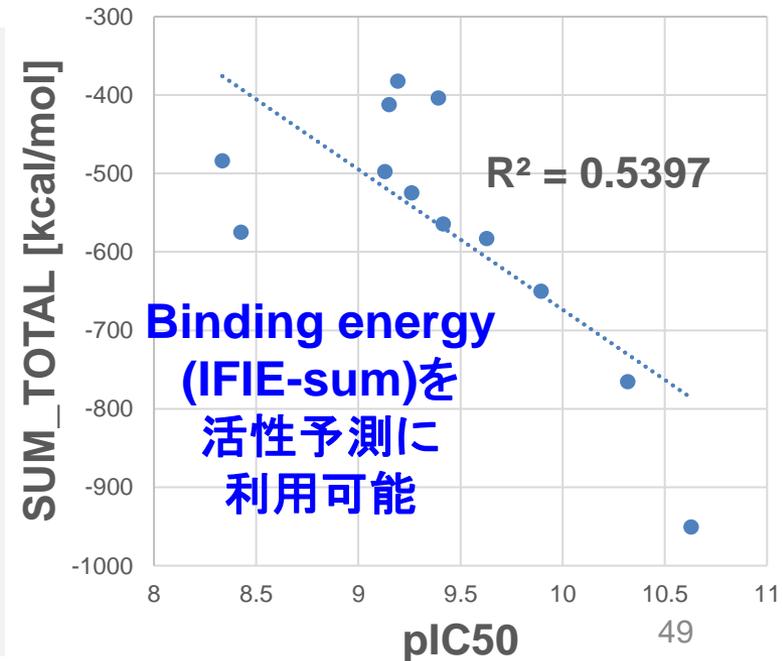
この部分に用いるFMO DB IDを羅列

- ② 出力は下記のように、FMO DB IDごとに返ってくる (下記は異なる系の出力例)。
“SUM_TOTAL”に対応する数値 (赤枠内) を何らかの方法で抜き出し、 pIC_{50} との相関を確認する。

```
{"Lists":[{"Fmodbld":"V2G31","Content":{"FMO DB_registration_note_data_format":"0.1","SUM_M_Fragment_numbers":"1-112,114-318","SUM_N_Fragment_numbers":"319","PIEDA_SUM_ES":"-141.4486","PIEDA_SUM_EX":"84.6444","PIEDA_SUM_CT":"-39.4898","PIEDA_SUM_DI_MP2":"-85.3411","PIEDA_SUM_q_IJ":"0.2160","SUM_TOTAL":"-181.6351","IFIE_SUM_MP2":"-181.6351","IFIE_SUM_HF":"-96.2940","Binding_Energy_Label":"Ligand binding energy without solvent","note":"This value is summation of IFIE between receptor and ligand fragments without solvent fragments."}],
```

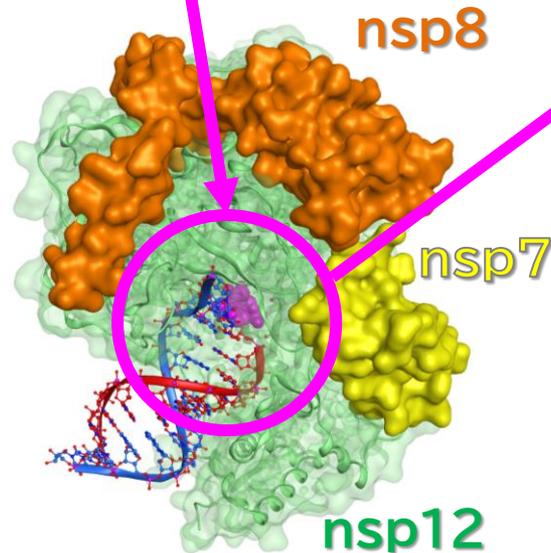
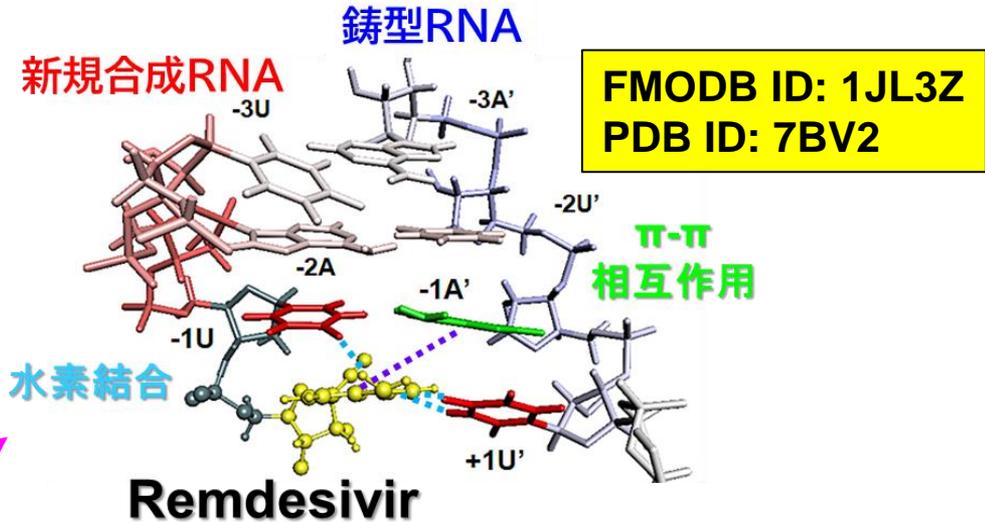
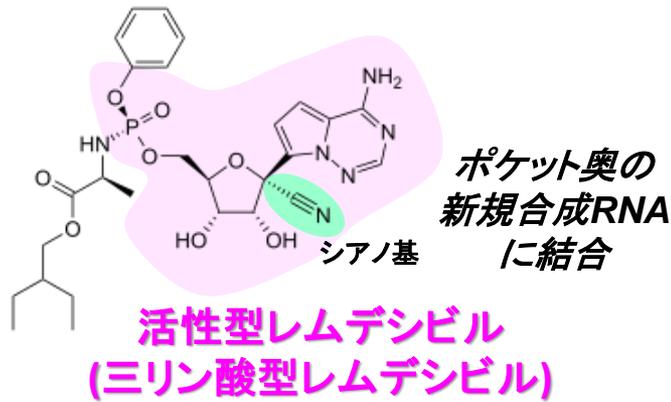
⋮

```
 {"Fmodbld":"1JLMZ","Content":{"FMO DB_registration_note_data_format":"0.1","SUM_M_Fragment_numbers":"1-144,146-304","SUM_N_Fragment_numbers":"305","PIEDA_SUM_ES":"-28.6184","PIEDA_SUM_EX":"25.6170","PIEDA_SUM_CT":"-8.5558","PIEDA_SUM_DI_MP2":"-32.3115","PIEDA_SUM_q_IJ":"0.0014","SUM_TOTAL":"-43.8687","IFIE_SUM_MP2":"-43.8687","IFIE_SUM_HF":"-11.5572","Binding_Energy_Label":"Ligand binding energy","note":"removed the IFIE of CYS145 }"}, {"Count":3}
```



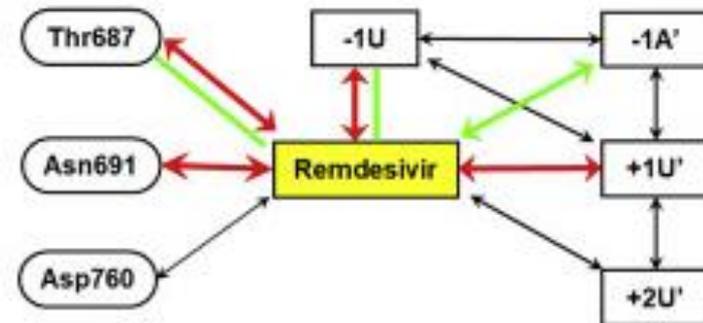
SARS-CoV-2 RdRp-RNA-Remdesivirの相互作用解析

K. Kato et al., *J. Mol. Graph. Model.* 100 (2020) 107695.



RdRp-RNA-Remdesivir complex

↓
煩雑なタンパク、リガンド、核酸が関与する相互作用ネットワークを模式図にすることで俯瞰的に理解



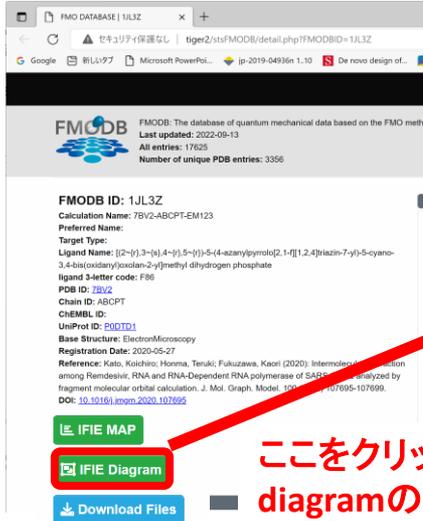
FMODB上で自動で相互作用ネットワーク図を描画できないか？

活用事例3: SARS-CoV-2 RdRp-RNA-RemdesivirのIFIE-diagram(1)

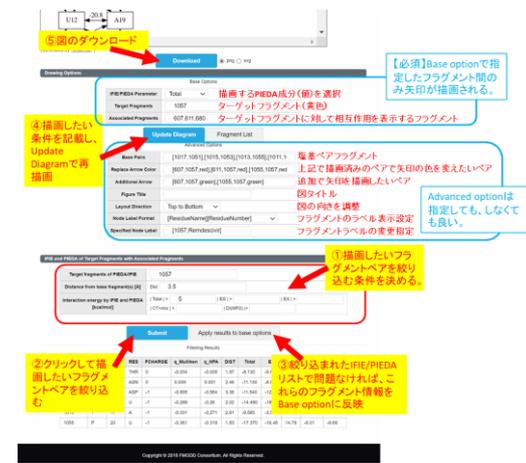
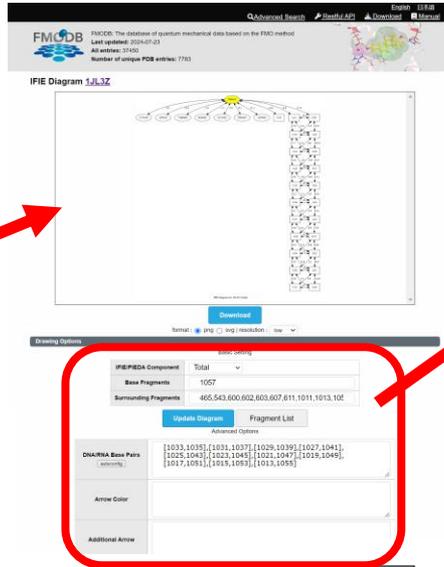
FMODB各エントリーページ

IFIE diagram webインターフェイス

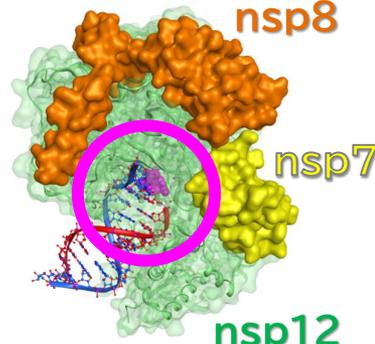
各種描画設定



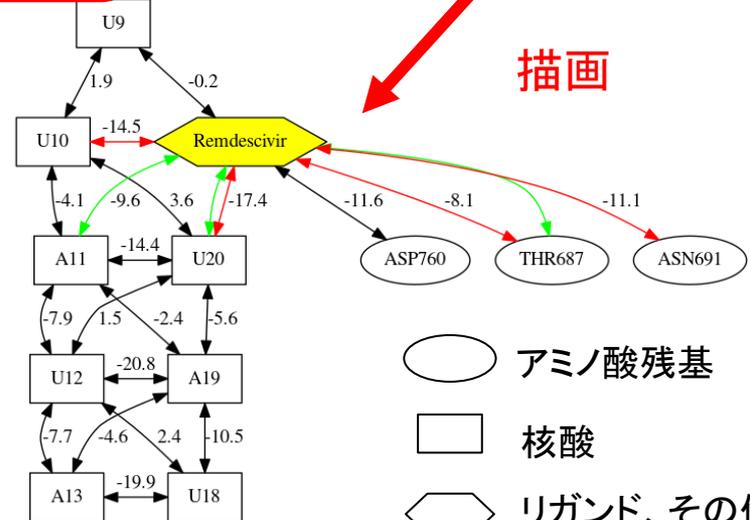
ここをクリックするとIFIE diagramのWebインターフェイスが起動する。



レムデシビルに対するRdRp、核酸間との相互作用エネルギーダイアグラム生成



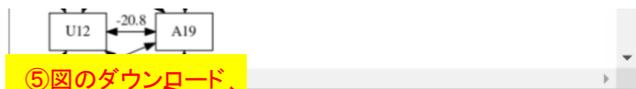
RdRp-RNA-レムデシビル複合体



描画

- アミノ酸残基
- 核酸
- リガンド、その他分子

活用事例3: SARS-CoV-2 RdRp-RNA-RemdesivirのIFIE-diagram(2)



⑤ 図のダウンロード

Download

Drawing Options

Base Options

IFIE/PIEDA Parameter: Total
Target Fragments: 1057
Associated Fragments: 607,611,680

【必須】Base optionで指定したフラグメント間のみ矢印が描画される。
描画するPIEDA成分(値)を選択
ターゲットフラグメント(黄色)
ターゲットフラグメントに対して相互作用を表示するフラグメント

④ 描画したい条件を記載し、Update Diagramで再描画

Update Diagram

Fragment List

Advanced Options

Base Pairs: [1017,1051],[1015,1053],[1013,1055],[1011,1057]
Replace Arrow Color: [607,1057,red],[611,1057,red],[1055,1057,red]
Additional Arrow: [607,1057,green],[1055,1057,green]
Figure Title:
Layout Direction: Top to Bottom
Node Label Format: [ResidueName][ResidueNumber]
Specified Node Label: [1057,Remdescivir]

塩基ペアフラグメント
上記で描画済みのペアで矢印の色を変えたいペア
追加で矢印を描画したいペア
図タイトル
図の向きを調整
フラグメントのラベル表示設定
フラグメントラベルの変更指定

Advanced optionは指定しても、しなくても良い。

IFIE and PIEDA of Target Fragments with Associated Fragments

Target fragments of PIEDA/IFIE: 1057
Distance from base fragment(s) [Å]: Dist: 3.5
Interaction energy by IFIE and PIEDA [kcal/mo]: | Total | > 5 | ES | > | EX | > | CT+mix | > | Di(MP2) | >

① 描画したいフラグメントペアを絞り込む条件を決める。

Submit Apply results to base options

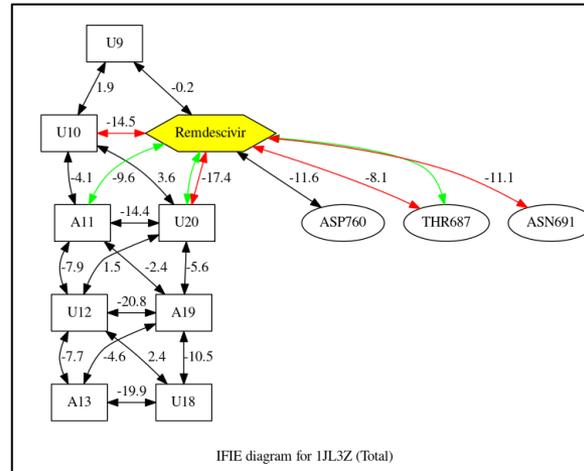
Filtering Results

RES	FCHARGE	q_Mulliken	q_NPA	DIST	Total	ES	EX	CT+mix	Di(MP2)
THR	0	-0.034	-0.005	1.97	-8.130	-8.130	-8.130	-8.130	-8.130
ASN	0	0.009	0.001	2.46	-11.130	-11.130	-11.130	-11.130	-11.130
ASP	-1	-0.895	-0.964	3.36	-11.540	-11.540	-11.540	-11.540	-11.540
U	-1	-0.289	-0.26	2.02	-14.490	-14.490	-14.490	-14.490	-14.490
A	-1	-0.331	-0.271	2.61	-9.580	-9.580	-9.580	-9.580	-9.580
1055	P	20	U	-1	-0.361	-0.318	1.83	-17.370	-17.370

② クリックして描画したいフラグメントペアを絞り込む

③ 絞り込まれたIFIE/PIEDAリストで問題なければ、これらのフラグメント情報をBase optionに反映

⑥ ダウンロードしたPIEDA Diagram図



Basic Settingに指定した値

TargetFragments: 1057
Surrounding Fragments: 607,611,680

Advanced optionに指定した値

BasePairs: [1017,1051],[1015,1053],[1013,1055],[1011,1057],[1009,none]
Replace Arrow Color: [607,1057,red],[611,1057,red],[1055,1057,red],[1013,1057,green],[1011,1057,red]
Additional Arrow: [607,1057,green],[1055,1057,green]
Node Label: [1057,Remdescivir]

Copyright © 2018 FMOOD Consortium. All Rights Reserved.

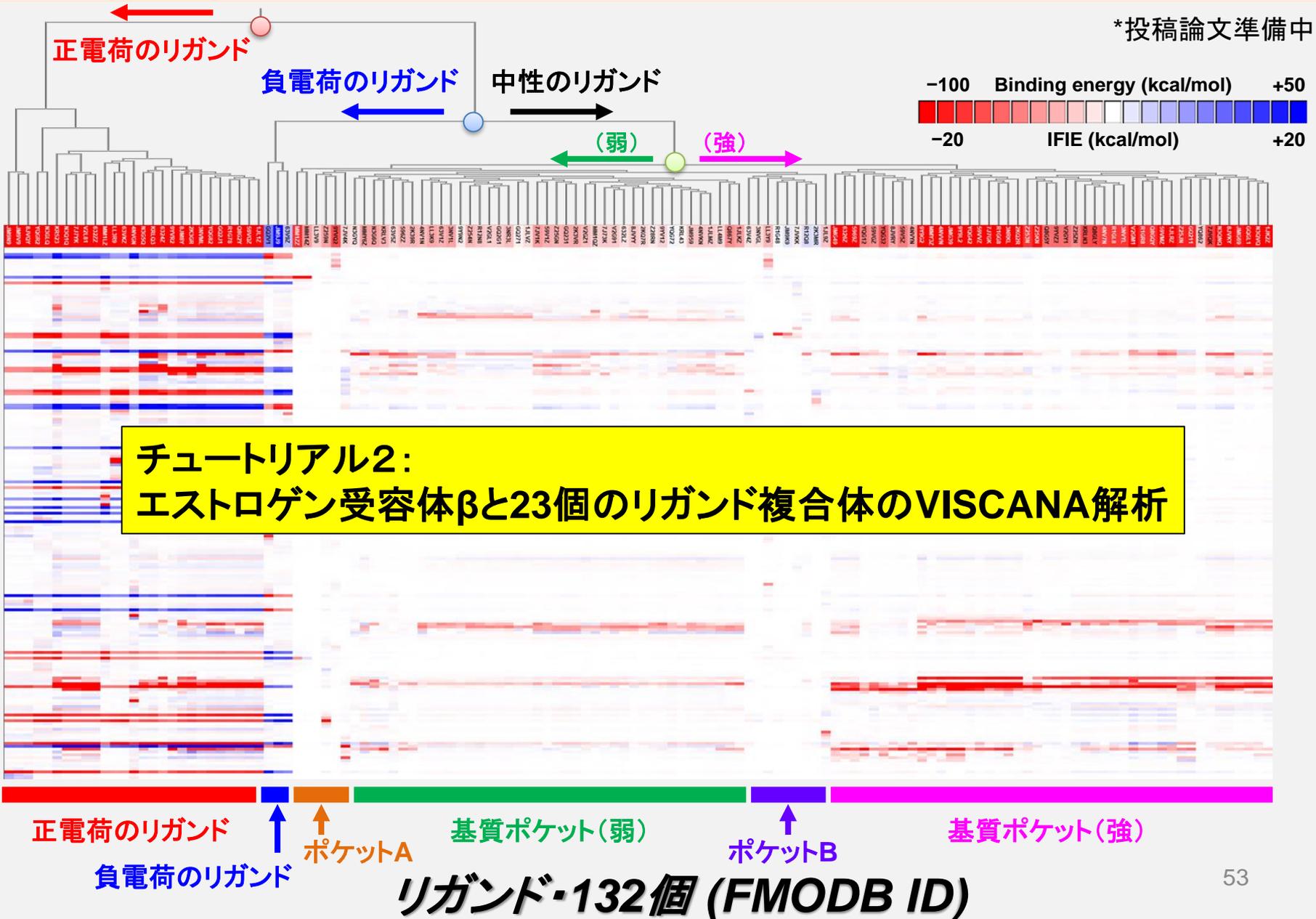
【機能アップデート】
塩基ペアをFMOOD自動判定できるようにした

New!!

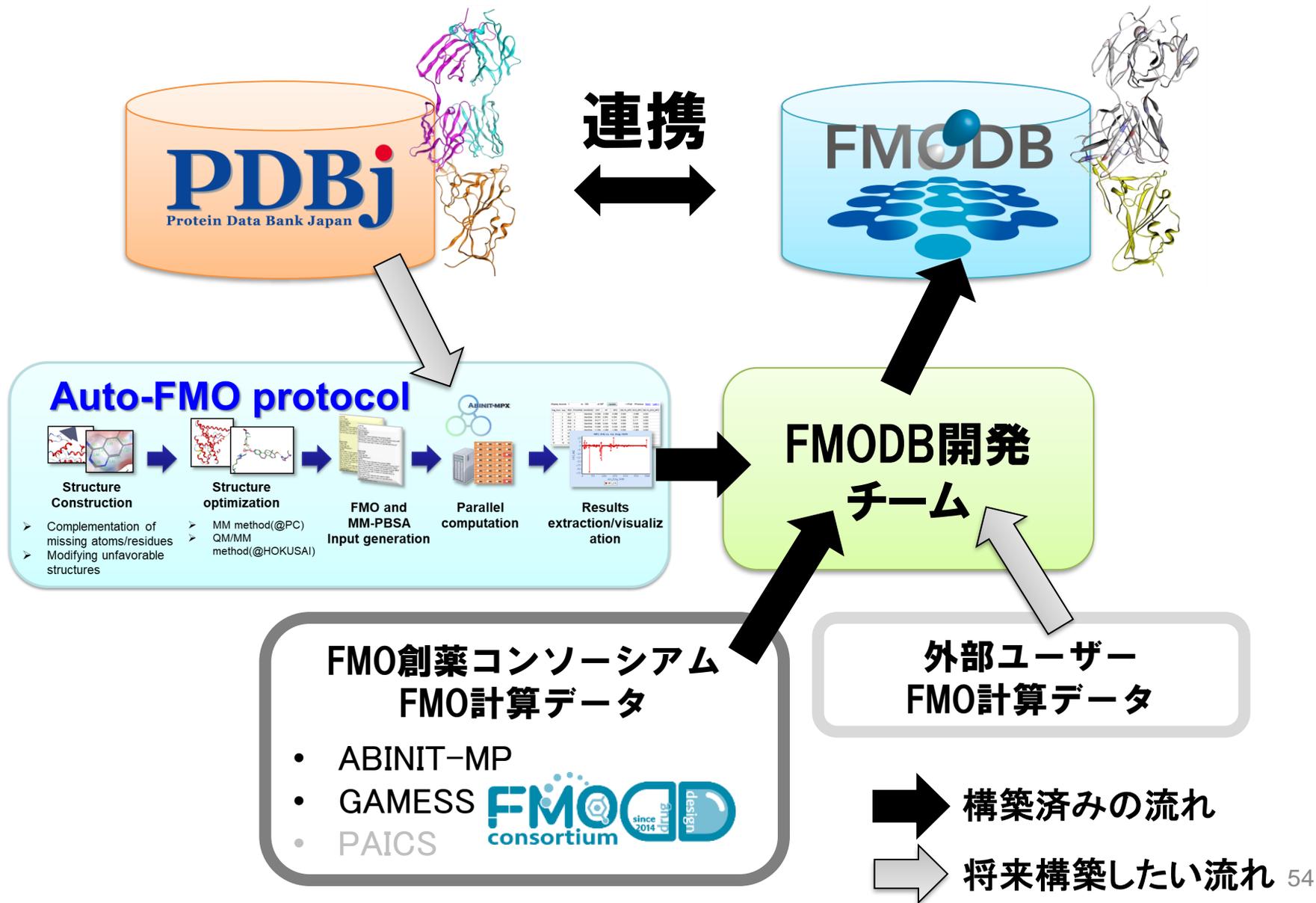
活用事例3: SARS-CoV-2 main proteaseのVISCANA解析

*投稿論文準備中

リガンドと各アミノ酸残基間のIFIE



今後の展望：FMOODBへのデータ登録



まとめ

- FMODB・Webインターフェイスの開発、及びデータ蓄積は、今後も引き続き行います。
- Webインターフェイスの改良については、ユーザーの意見を取り込んでいきたいため、アンケートにご協力いただければと思います。
- 当面のデータ登録はFMODDコンソメンバーのみに限られるため、GAMESSやPAICSデータを登録してくれるメンバーを募りたい。長期的な目標としては、外部ユーザーが登録することも目指しています。

FMO関連の発表

- **P03-14**

Recent Developments of FMO DB in 2024: Efforts Towards Utilization of FMO data
Kikuko Kamisaka

発表是非お立ち寄りください！

- **P04-01★**

Analysis of Kinase Binding Specificity of Staurosporine using the Fragment Molecular Orbital Method
Ruri Mihata

- **P07-11★**

Structure and Interaction Analysis of Nucleic Acid Encapsulated ssPalm Lipid Nanoparticles by Multiscale Simulation.
Naoko Konam

- **P02-08★**

Machine learning based prediction of quantum mechanical interaction energy between amino acid residues using fragment molecular orbital method
Tomohiro Sato

- **P04-02★**

Dynamical Interaction Energy Analysis of Elastase in Each Reaction State: Insights from Molecular Dynamics and Fragment Molecular Orbital Calculations
Shuhei Miyakawa

- **P02-13★**

Prediction of quantum mechanical interactions between the ligand and each amino acid residue in protein-ligand complexes
Ryosuke Kita

- **O08-06**

Progress of data collection in FMO database and efforts to evaluate structural qualities of biological macromolecules using quantum chemical interaction energy analysis
Chiduru Watanabe

- **SP03 『AMED/BINDSインシリコ解析ユニットが提供するアプリケーション：チュートリアルと適用例の紹介』**

高谷大輔