YASARA

スタートアップガイド

株式会社アフィニティサイエンス

Revision: 2023 年 7 月 11 日（1.0.0）

株式会社アフィニティサイエンス
〒141-0031 東京都品川区西五反田 1-11-1 アイオス五反田駅前

TEL: 03-6417-3695
FAX: 03-6417-3696
Email: help@affinity-science.com / sales@affinity-science.com
Web: https://www.affinity-science.com

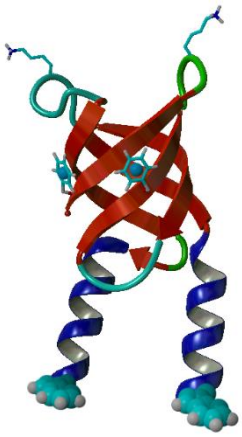
もくじ

はじめに

本マニュアルは、はじめて YASARA を使う方や、久しぶりに使用する方を対象として、基本的な GUI 操作についてまとめています。YASARA には、使い始めた方を対象にしたインタラクティブなチュートリアル（help movie > 1.1 Working with YASARA）が用意されていますが、操作を忘れた際に一からチュートリアルを行わずに内容を確認できるよう、基本的な操作方法をこのマニュアルに文書としてまとめることにしました。

本マニュアルの構成は、はじめに画面構成について紹介した後、基本操作を①と②に分けて説明しています。
YASARA の基本操作① では、チュートリアル形式で実際に操作しながら、マウス操作や表示スタイル変更などの基本的な操作方法を確認できるようにしています。
YASARA の基本操作② では、説明形式で、独自のファイル形式やセーブ・ロード方法、ヘルプの利用方法について記載しています。
付録には、YASARA 独自の用語をまとめた用語集、本文で紹介しきれなかったものを含むマウス・キーボード操作の一覧表、対応ファイル形式の一覧表を資料として添付しました。

本マニュアルを、YASARA のスムーズな導入にお役立ていただければ幸いです。



※このマニュアルは、YASARA Structure Version 22.8.22 を使用して作成しました。

1　画面の構成

YASARA を起動（Windows であれば、インストールフォルダ ＞yasara＞YASARA.exe をダブルクリック）すると、以下のような初期画面が表示されます。
（④が表示されていない場合は、＜I＞キーまたは＜**Insert**＞キーを押すと表示されます。）

① メニューバー

各種操作・設定を行うメニューバーです。各メニューの詳細はユーザーマニュアルを参照してください。（***Help***＞***Show user manual*** → Commands-Tell YASARA what to do）
※ユーザーマニュアルの使い方については、3.3 ヘルプの活用（p. 31）に記載しています。

② 操作アイコン

メニューバーの隣には操作アイコンが並んでいます。次のページにアイコンと機能の一覧を示します。
※YASARA 独自の用語については、付録の用語集にまとめています。

・操作アイコン一覧

	Building small molecules	低分子 Building モードへの切り替え
	Rectangular selection	長方形状に Atom を選択
	Lasso selection	なげなわ状に Atom を選択
	Undo	操作を一つ戻す
	Redo	操作を一つ進める
	New scene	Soup をすべて削除し、新しい Scene を始める
	Open scene	Scene ファイルを開く
	Save scene	Scene ファイルを上書き保存する
	Fit to screen	Scene を画面いっぱいに収まるように移動させる
	Jump back	ラベルが含まれているマクロやムービーを、 一つ前のラベルに戻す
	Jump forward	ラベルが含まれているマクロやムービーを、 一つ次のラベルに進める
	Autorotate	Z 軸中心で Scene を回転させる

③ 3D ウィンドウ

オブジェクトの表示や操作などを行います。

背景色の変更：*View*＞*Color*＞*Background*

④ HUD（head up display）

3D ウィンドウ上の左右に表示される透明のヘッドアップディスプレイです。原子の情報やオブジェクトのリストなどが表示されます。詳細は 2.4. HUD（head up display）（p. 9）に記載しています。

表示の ON/OFF：＜I＞キーまたは＜Insert＞キー

⑤ 各種情報

画面の下部には以下の情報が表示されています。

1	プロセッサー情報 （CPU スレッド数/GPU スレッド数）
2	空きメモリの割合（%）
3	座標系（L：左手系/R：右手系）

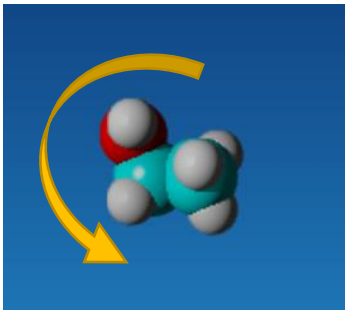
4	力場
5	シミュレーション状態
6	操作対象オブジェクト
7	原子数

2　YASARA の基本操作①

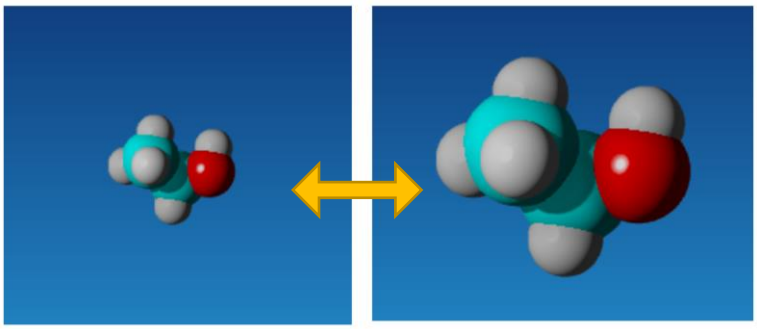
2.1　マウスとキーボードの基本操作

はじめに、マウスとキーボードの基本操作について紹介します。試しに、エタノール分子を表示して操作していきます。メニューバーから、***Edit*** > ***Build*** > ***Molecule from SMILES string*** を選択します。すると、SMILES の入力画面が表示されるので、「CCO」を入力し「OK」ボタンを押します。生成したエタノール分子を使って、以下の操作を試してみてください。（分子の作図方法はいくつかありますが、ここでは SMILES から作成しています。）
※マウス・キーボード操作の一覧表を付録にまとめています。

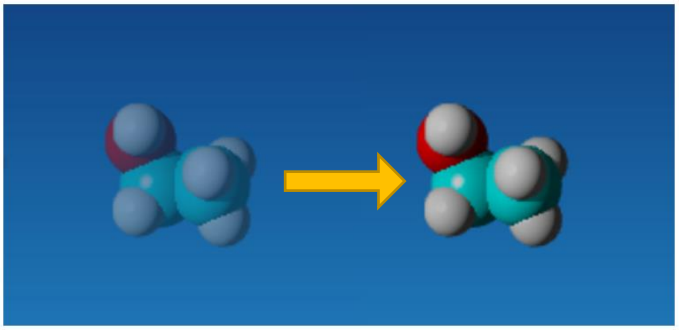
✧　回転：左クリック＋ドラッグ



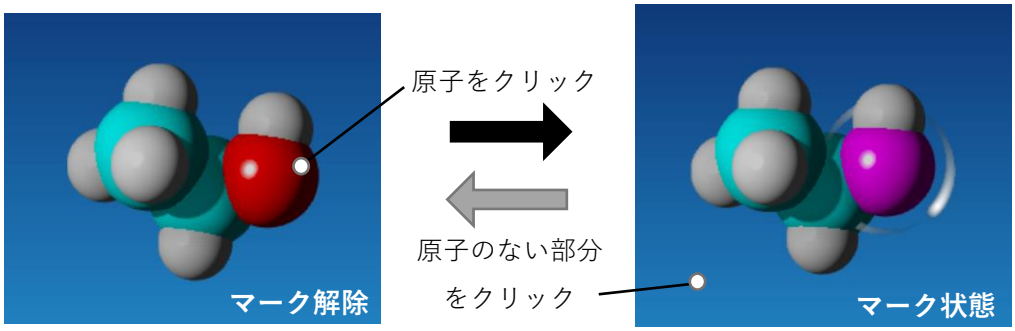
✧　拡大・縮小（Z 軸方向の移動）：右クリック＋ドラッグ



✧　並進移動（XY 平面上の移動）：左右同時（or 中央）クリック＋ドラッグ

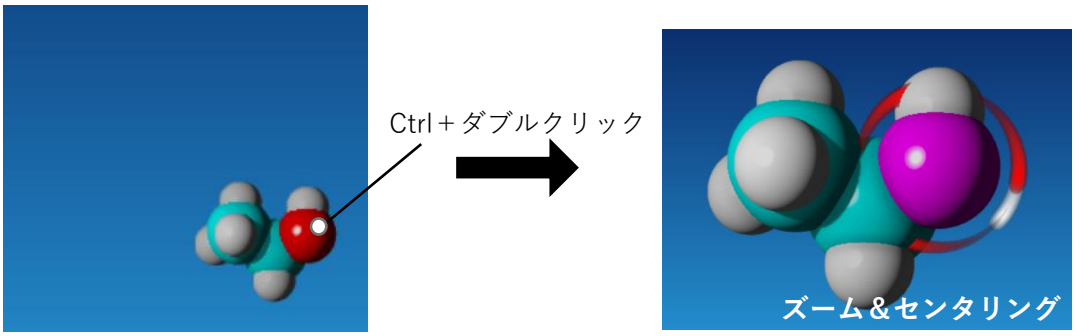


✧　原子をマーク：対象原子を左クリック（Ctrl キーを押しながら複数選択も可能）



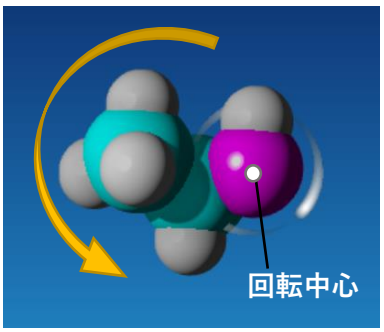
原子をマーク状態にすると、カラフルに点滅して周りにハイライトが表示されます。マーク状態にすると、左側の HUD（Atom properties）から原子の情報などを確認できます。詳細は、2.4 HUD（head up display）（p.9）に記載しています。

✧　対象原子のズーム：Ctrl＋左ダブルクリック
対象原子がマーク状態になり、画面中央に拡大表示されます。



この操作を行うと、マークした原子が含まれる残基の中心付近（タンパク質の場合はアミノ酸残基のα炭素）にセンタリングされます。センタリングを初期の状態に戻したいときは、以下の操作を行ってください。
センタリングを初期状態に戻す：*Effects* > *Center* > *Stop global centering*

✧　マークした原子を中心とした回転：原子をマーク＋Ctrl＋左クリック＋ドラッグ



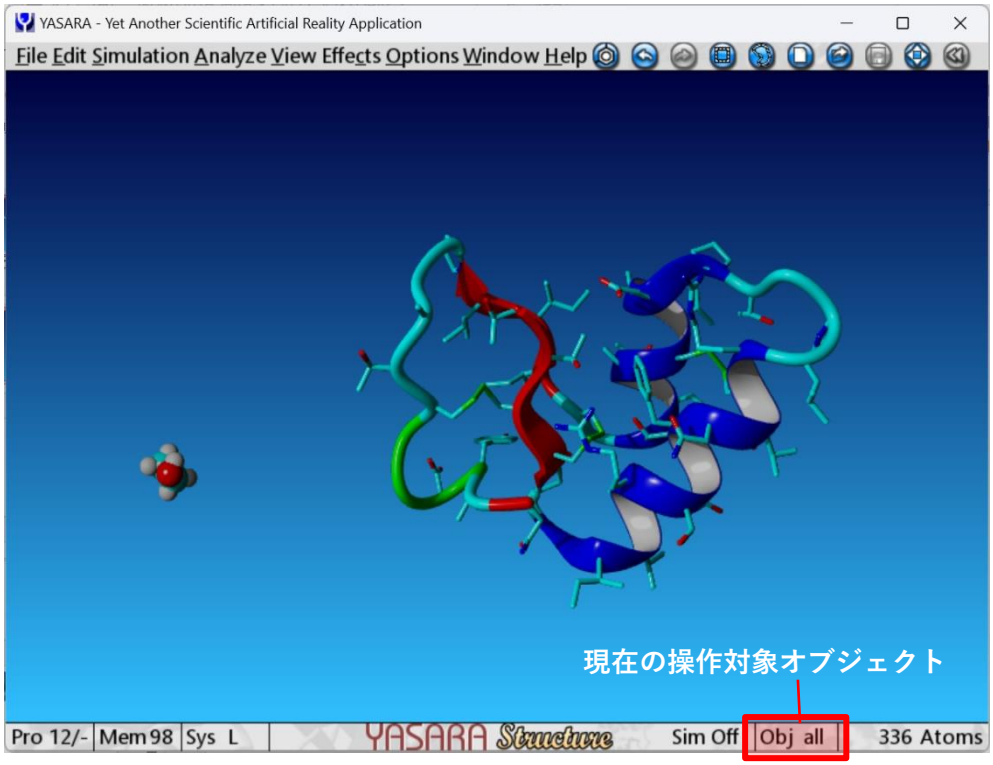
✧　操作対象オブジェクトの切り替え：(Ctrl＋) Shift キー

オブジェクトが複数ある場合、Shift キーを押すことで操作対象を切り替えることができます。今度は試しに、Crambin というタンパク質（PDB ID：1crn）の構造をインターネットからロードして、オブジェクトを追加してみます。メニューバーから、***File***＞***Load***＞***PDB file from internet*** を選択してください。ダイアログボックスが表示されるので、PDB ID の入力欄に「**1crn**」と入力し、「**OK**」ボタンを押して構造をロードします。

※ファイルの種類やロード、セーブ方法などの詳細については 3.2 ファイルのロードとセーブ（p. 25）に記載しています。

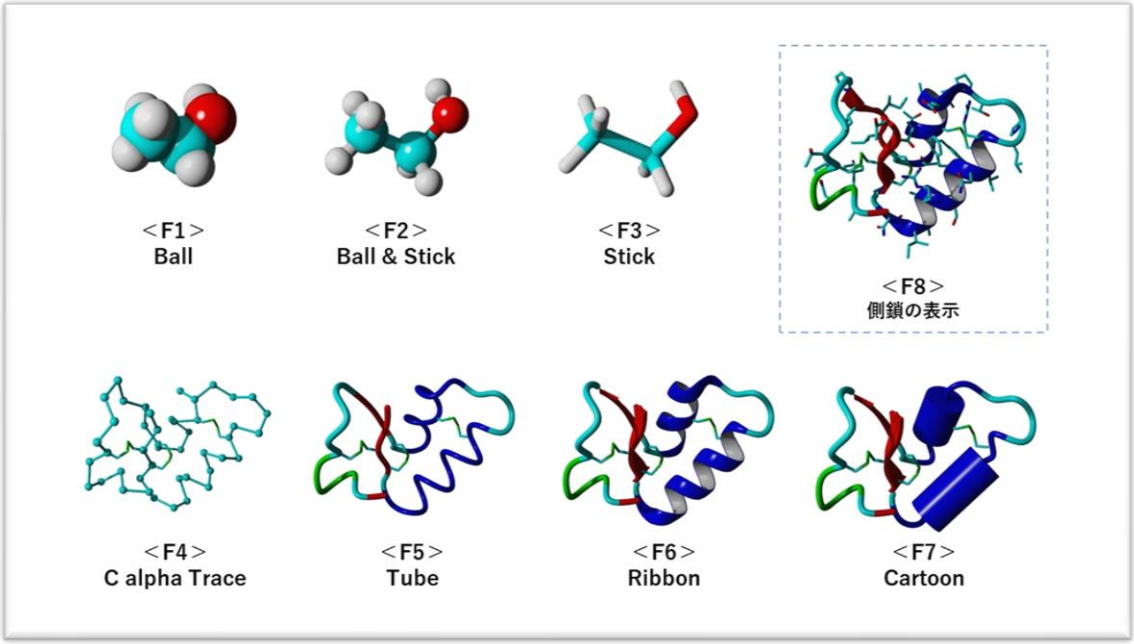
画面上にエタノール分子と Crambin タンパク質（1crn）の 2 つのオブジェクトが表示されました。Shift キーを押していくと、操作対象のオブジェクトが「すべて」→「オブジェクト 1」→「オブジェクト 2」→…、の順に切り替わっていき、個別に操作することが可能です。(Ctrl＋Shift では逆の順に切り替わります。)

なお、現在の操作対象オブジェクトは画面右下から確認できます。



2.2　表示スタイル

分子の表示スタイルは、＜F1～8＞キー（または＜Alt＞+＜1～8＞）で変更できます。



＜F8＞キー（または＜Alt＞+＜1＞）を押すと、側鎖を表示できます。連続して押すと、側鎖のスタイルが切り替わります（なし→ stick → ball&stick）。＜F1～8＞キーを押して操作を試してみてください。

また、表示スタイルはメニューバーからも変更できます。

スタイル変更：*View*＞*Style scene*

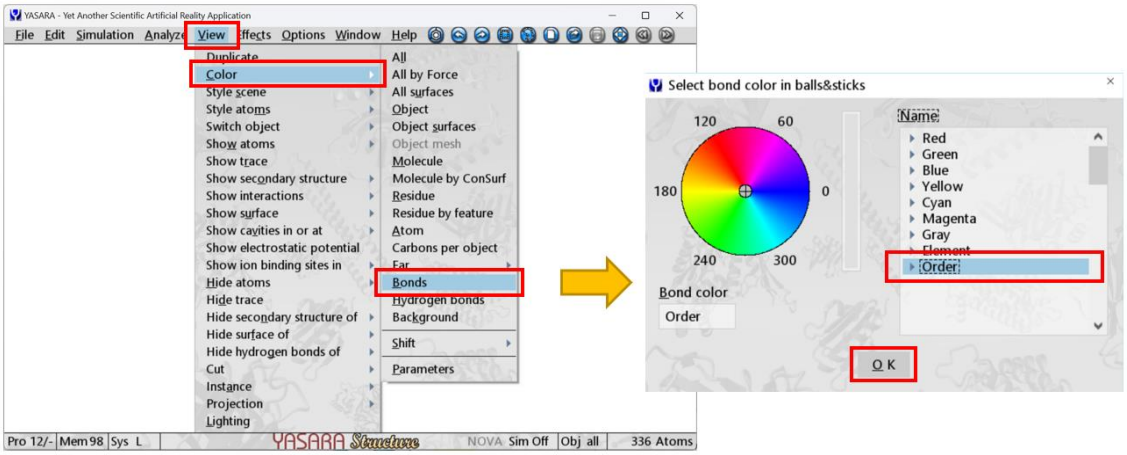
＜マウス・キーボード操作のまとめ＞

動作内容	操作
回転	左クリック＋ドラッグ
拡大・縮小（Z 軸方向の移動）	右クリック＋ドラッグ
並進移動（XY 平面上の移動）	左右同時（or 中央）クリック＋ドラッグ
原子をマーク	対象原子を左クリック （Ctrl キーを押しながら複数選択も可能）
対象原子のズーム・センタリング	Ctrl＋左ダブルクリック
マークした原子を中心とした回転	原子をマーク＋Ctrl＋左クリック＋ドラッグ
操作対象オブジェクトの切り替え	Shift キー
表示スタイル変更	F1～8 キー

2.3　結合次数と配色

結合次数を確認するには、色で表示する方法が便利です。次の操作でボンドの色を結合次数に応じた配色に変更できます。ボンドの色を確認するには、表示スタイルを”ball & stick”（**F2** キー）に変更してください。

ボンドの色を結合次数の配色に変更：***View*** > ***Color*** > ***Bonds*** →「**Order**」を選択
※表示スタイルは”ball & stick”（**F2** キー）を指定



＜結合次数の配色＞

色	結 合 名	結合次数
グレー (gray)	単結合 (Single bond)	1
青 (blue)	共鳴 (Resonance bond)	1.25
マジェンタ (magenta)	共鳴 (Resonance bond)	1.33
赤 (red)	共鳴 (Resonance bond)	1.5
オレンジ(bright orange)	共鳴 (Resonance bond)	1.66
黄 (yellow)	二重結合 (Double bond)	2
ライムグリーン (lime green)	共鳴 (Resonance bond)	2.5
緑 (green)	三重結合 (Triple bond)	3
シアン (cyan)	四重結合 (Quadruple bond)	4

2.4　HUD（head up display）

HUD は 3D ウィンドウ上の左右に表示される背景透明のディスプレイです。表示の ON/OFF は＜**I**＞キーまたは＜**Insert**＞キーで行います。画面の左側には「Atom properties」が、右側には「Scene content」が表示されます。また、＜**Ctrl**＞+＜**I**＞キーを押すと右側が「Simulation parameters」に切り替わります。

※「Simulation parameters」については、ユーザーマニュアルの Commands - Tell YASARA what to do -> Simulation - Simulate the soup -> Simulation parameters をご覧ください。

HUD 表示の ON/OFF：＜**I**＞または＜**Insert**＞
HUD 表示の切り替え：＜**Ctrl**＞+＜**I**＞

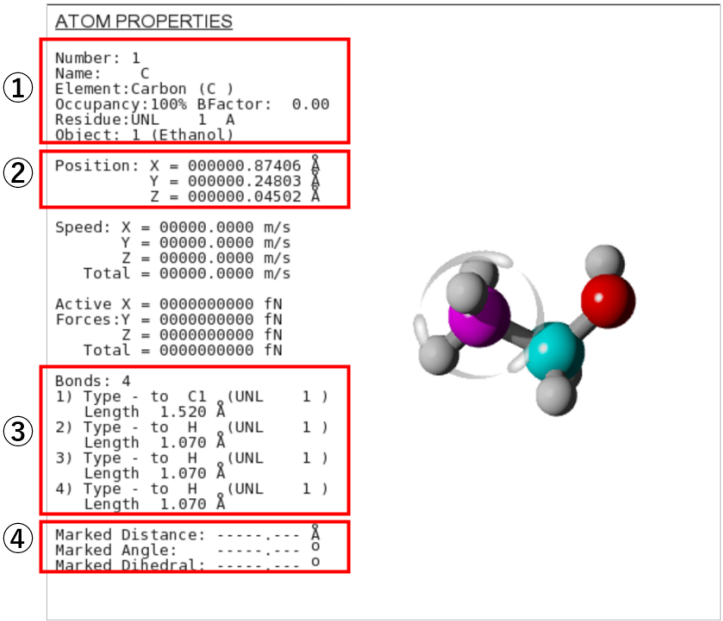
表示内容の説明に入る前に、HUD で用いられる YASARA の基本用語を紹介します。
それぞれの包括関係は YASARA を使用するうえで重要なので、下の表を参考にしてください。

Atom	**原子**を表す。各 Atom には元素名（Element）の他に固有の名前（Name）と番号（Number）が振られている。
Residue	**残基**を表す。各 Residue は Atom から構成され、固有の名前（Name）と番号及びコード（Number, Insertion code）が振られている。
Molecule	**分子**を表す。各 Molecule は Residue から構成され、固有の名前（Name）が振られている。
Object	Molecule 及び追加アイテム（矢印やラベルなど）の集合体を表す。 アクティブ/非アクティブを切り替えることができる。
Soup	アクティブな Object に含まれるすべての Atom を意味する。 （矢印やラベルなどは含まれない。）
Scene	すべての Object をひとまとめにしたものを意味する。 （矢印やラベルなども含まれる。）

※上記を含む YASARA 独自の用語については付録の用語集にまとめて記載しています。

✧ ATOM PROPERTIES

画面左側に表示され、ここから **Atom**（原子）の詳細情報を確認することができます。試しに、エタノール分子のいずれかの原子をクリックし、マークしてください。（エタノール分子の表示方法は p. 4 をご覧ください。）



すると上の図のように、マークした原子の情報が表示されます。

① **Atom**（原子）情報

上部には Atom の基本情報が記載されています。各 Atom には元素名(Element)の他に固有の名前（Name）と番号（Number）が振られており、それらの情報を確認することができます。また、選択した Atom が属している残基や分子、オブジェクトの情報もここから確認できます。

```
Number: 1     原子に振られた番号
Name:     C     原子に振られた名前
Element:Carbon (C )     元素名
Occupancy:100% BFactor:   0.00     占有率、温度因子
Residue:UNL     1   A     この原子が含まれている残基名、残基番号、分子名
Object: 1 (Ethanol)     この原子が含まれているオブジェクトの番号、（オブジェクト名）
```

② Position 情報

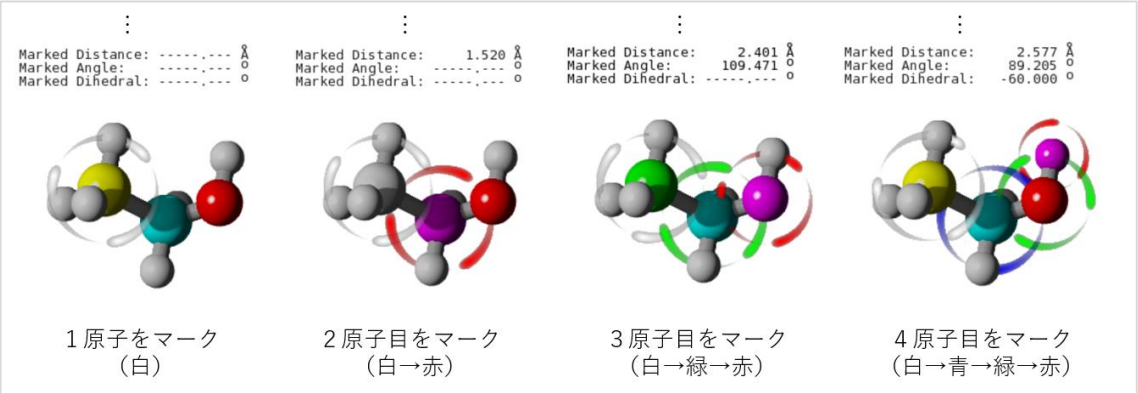
マークした原子の座標情報が記載されています。

③ Bond 情報

マークした原子の結合の本数、結合先の原子名、結合長の情報が記載されています。

④　距離、角度、二面角の情報

Ctrl キーを押しながら原子をクリックすると複数の原子をマークすることができ、原子間の距離、角度、二面角を調べることができます。複数選択された原子は、ハイライトのカラーで区別されます。



Marked Distance	マークした原子（白ー赤）間の距離
Marked Angle	マークした原子（白ー緑ー赤）間の角度
Marked Dihedral	マークした原子（白ー青ー緑ー赤）間の二面角

Tips：HUD の色の変更方法

HUD の色はデフォルトでは白色に設定されており、背景色が明るくなると自動的に黒色に反転します。

他の色に変更したい場合は、メニューバーの *Window* > *Head-up display* > *Color* から変更できます。もしくは、コマンドコンソール*から「**ColorHUD Red**」や「**ColorHUD ff0000**」などと入力することでも変更できます。

なお、この変更はソフトの再起動後も維持されます。デフォルトの設定に戻したい場合は、上記の操作で「**White**」に変更してください。

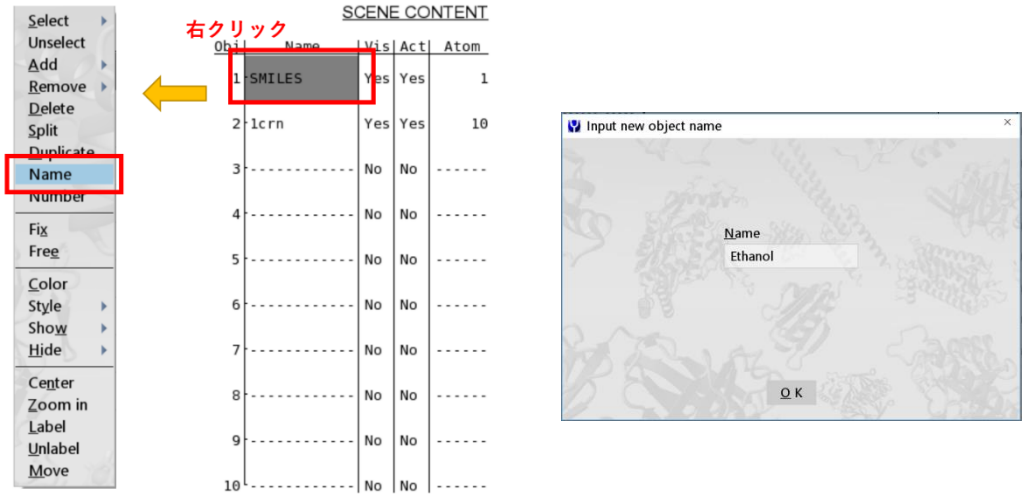
*コマンドコンソールの使い方については p. 23 をご覧ください。

✧ SCENE CONTENT

次に、右側の HUD に表示されている「Scene content」について紹介します。YASARA における「Scene」は、すべてのオブジェクトをひとまとめにしたものを意味します。したがって、ここでは全てのオブジェクト、それらを構成する残基、分子、原子がリスト化されて表示されます。ここから、名前の確認や変更、可視化の ON/OFF などの設定ができます。以下の基本操作を試してみてください。

➢ オブジェクト名の変更

先ほど作成したエタノール分子のオブジェクト名を「Ethanol」に変更してみます。現在のエタノール分子のオブジェクト名「SMILES」上で右クリックすると、コンテクストメニューが表示されます。メニューの中から **Name** を選択するとダイアログボックスが表示されるので、新規オブジェクト名「Ethanol」と入力します。

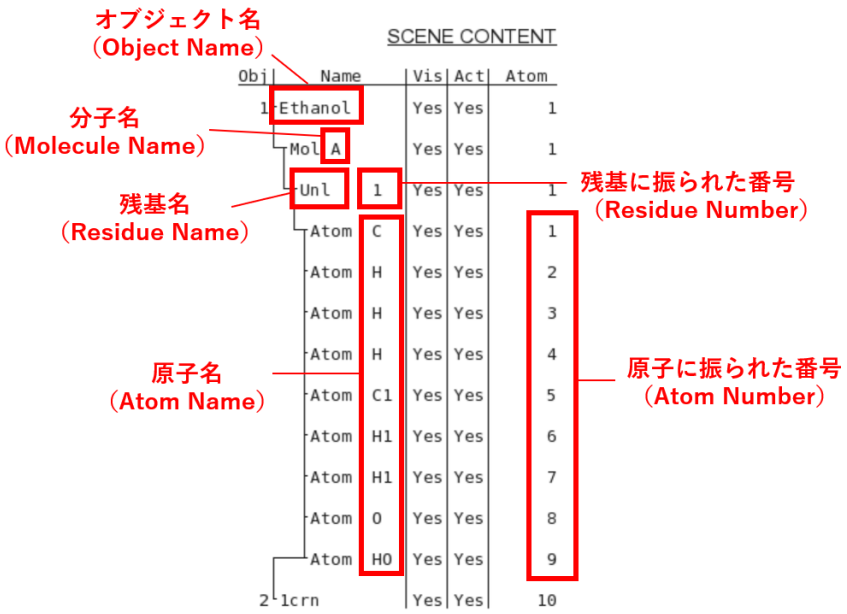


➢ 構成要素の確認

次に、各オブジェクトの構成要素を確認してみます。基本用語（p. 9）に記載した通り、各オブジェクトは分子から、分子は残基から、残基は原子から構成され、それぞれに名前や番号が振られています。

エタノールのような単分子でもこの構成になっていて、分子名や残基名も振られています。Scene content から確認してみましょう。

先ほどのエタノールのオブジェクト名をクリックすると、下に構成分子名（Mol A）が表示され、分子名をクリックすると構成残基名（Unl）が、さらに残基名をクリックすると構成原子名（Atom C、Atom H など）が表示されます。



オブジェクト名などをもう一度クリックすると、展開したリストを折りたたむことができます。

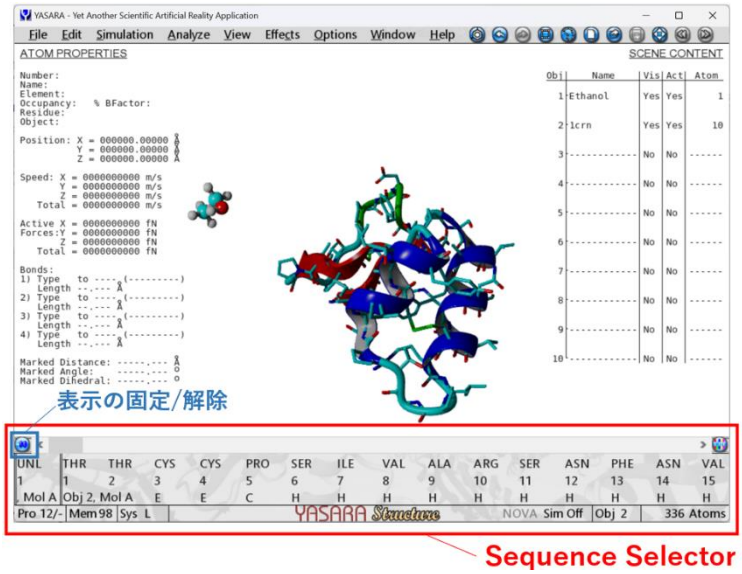
- 3D ビュー表示の ON/OFF

  3D ビュー表示の ON/OFF は、「Vis」列から設定できます。3D ビューに表示されているものは「Yes」、非表示のものは「No」と表記されます。「Vis」列上で左クリックすると「Yes/No」の切り替えができ、右クリックすると選択したもののみ表示（Yes）、他は非表示（No）となります。

2.5 Sequence Selector

カーソルを画面の下方に動かすと、Sequence Selector が表示され、アミノ酸配列の確認や、配列の検索などを行うことができます。左側にある青いピンアイコンをクリックすると常時表示の ON/OF ができます。先ほどロードした「1crn」の構造を使って、Sequence Selector の使い方を紹介します。

(PDB ファイルのロード方法は、p. 6 操作対象オブジェクトの切り替え をご覧ください)



左から残基番号順に並んでおり、１段目に残基名、２段目に残基番号、３段目に二次構造の情報が記載されています。

※二次構造の表記については、ユーザーマニュアルの Commands - Tell YASARA what to do -> Analyze – Analyze the soup -> Secondary structure analysis - Assign and predict secondary structure をご覧ください。

- マークとズーム

  Sequence Selector の残基名をクリックすると、選択したアミノ酸残基のα炭素がマークされます。Ctrl キーを押しながらクリックすると、マーク＋拡大表示されます。また、右クリックするとコンテクストメニューが開きます。

- 配列検索

  Sequence Selector 上にカーソルを乗せた状態でアミノ酸の一文字略号をキー入力すると、初めにヒットしたアミノ酸がマークされます。例えば、アラニンの略号である「**A**」キーを押すと、残基番号が９のアラニンがヒットします。

  複数のキーを続けて入力することで、配列の検索が可能です。例えば「**A**」「**I**」「**C**」キーを続けて押すと、アラニン(A)-イソロイシン(I)-システイン(C)の並びが検索され、先頭のアラニンがマークされます。

2.6　原子や残基の選択

✧　Select について

原子をクリックした際のマーク状態は一時的なものですが、永続的に選択状態にするには“Select”を用います。選択状態にすると、うす緑色に反射したようなエフェクトが掛かり、その後の操作で対象に指定することができます。

GUI から選択状態にするには、

- コンテクストメニュー*から Select を選択
  （*画面上でマークした原子を右クリック、HUD「SCENE CONTENT」の Name 列上で右クリック、Sequence Selector の残基名上で右クリック、などの操作で表示される）
- メニューバーの Edit > Select を選択
- メニュー横の選択アイコン  ）を使用

などの方法があります。

なお、選択状態を解除する場合は、メニューバーの Edit > Unselect を選択します。

✧　Select を使用した操作例（※要インターネット環境）

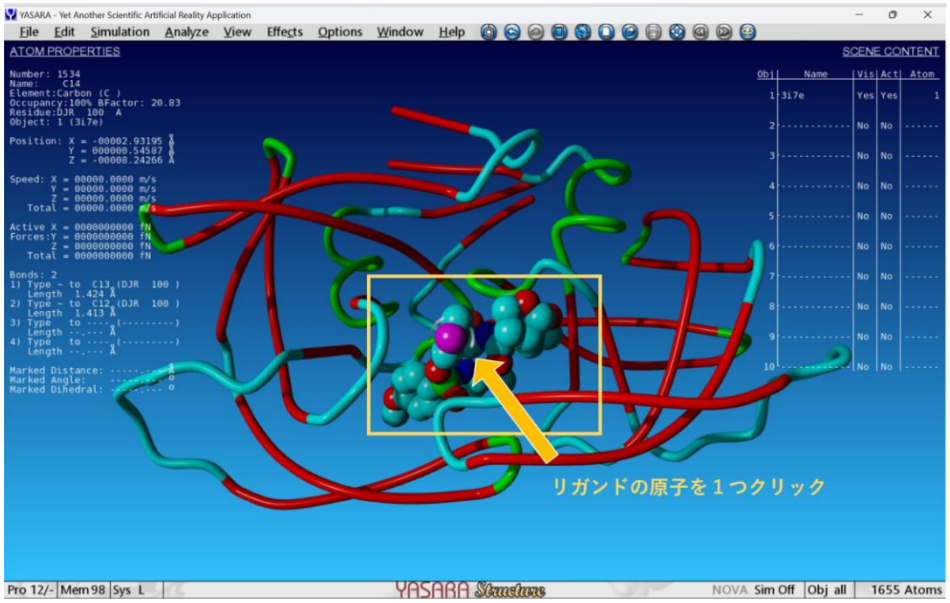
操作例として、HIV プロテアーゼと阻害剤の共結晶構造の PDB ファイル（PDB：3i72）について、“Select”を使ってリガンドから半径 13 Å 以内のアミノ酸残基を選択し、側鎖とラベルを表示してみます。

1. これまでのオブジェクトは使用しないので、残っている場合はメニューバーの ***File*** > ***New*** → **Yes** をクリック、または Clear Scene アイコン（  ）をクリックしてリセットしておきます。

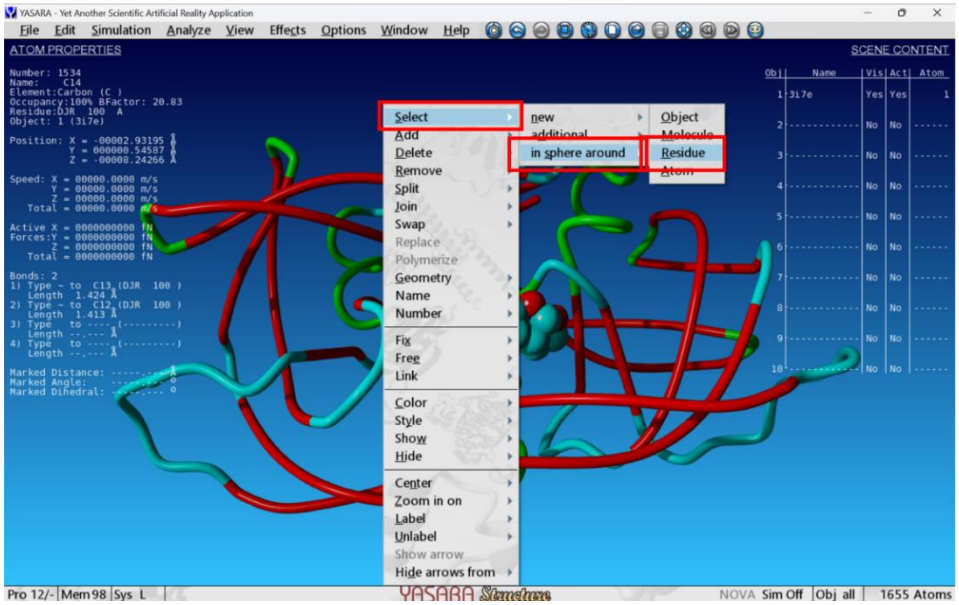
2. 準備ができたら、PDB ファイル（PDB：3i7e）をインターネットからロードします。（***File*** > ***Load*** > ***PDB file from internet*** を選択後、PDB ID の入力欄に「**3i7e**」と入力し、「**OK**」）

3. この後の操作を見やすくするために、表示スタイルを「Tube」（**F5** キー）にしておきます。

4. リガンド分子（デフォルトで Ball モデル表示されている分子）の原子を 1 つクリックし、マークします。

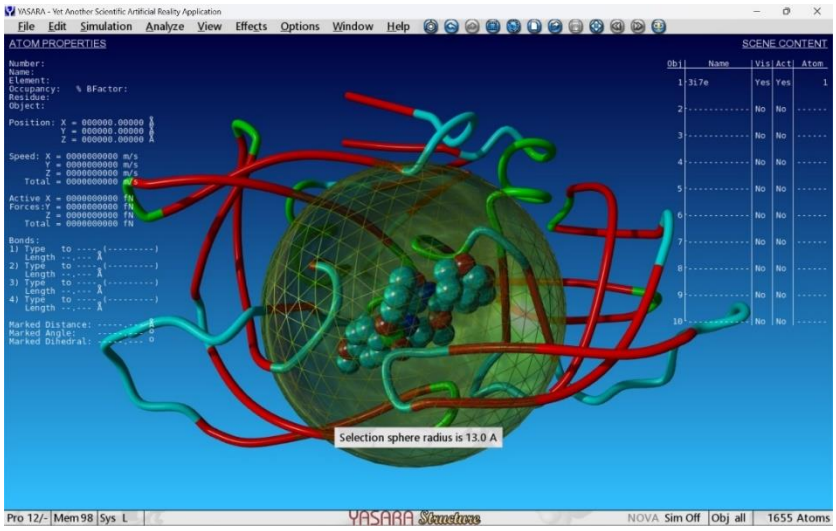


5. マークした原子を右クリックし、コンテクストメニューを開きます。
今回はリガンドから半径 13Å以内のアミノ酸残基を球形に選択したいので、メニューから ***Select*** > ***in sphere around*** > ***Residue*** を選択します。

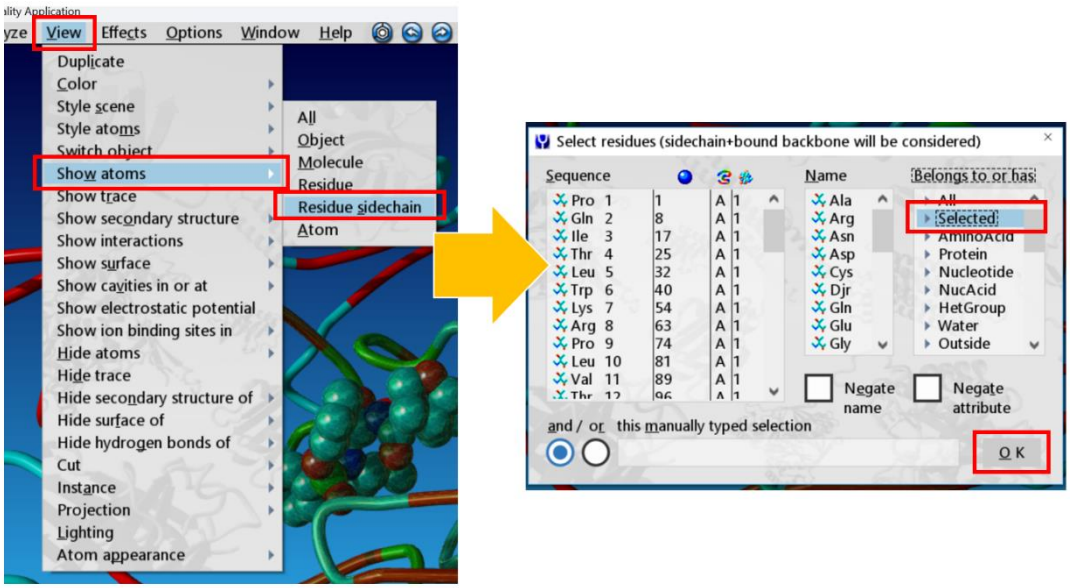


（Select > new では選択部分を再設定、Select > additional では現在の選択部分に追加、Select > in sphere around ではマークした部分を中心に球形に選択します。また、最後に選択単位を選びますが、今回は残基（Residue）を選択しました。これにより、球の中心はマークした原子が属する残基全体、つまりリガンド分子の中心となり、選択単位も残基ごととなります。）

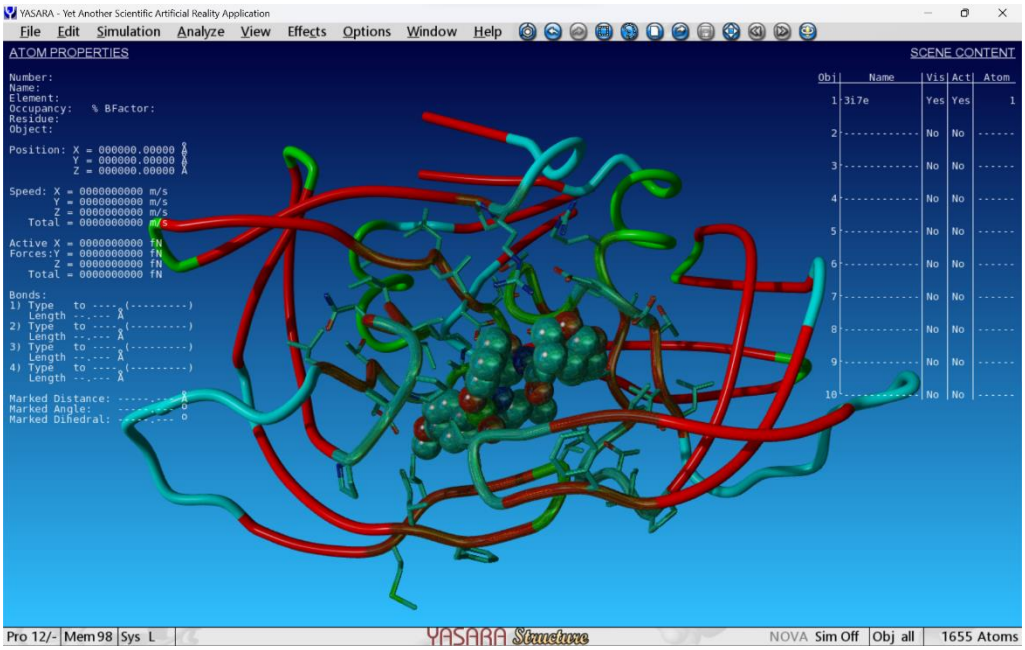
すると、リガンド分子を中心とした球が表示されるので、左クリックを長押ししながらドラッグし、目的の範囲（今回は半径 13Å）に合わせ、長押しを解除すると選択が完了します。選択された部分はうす緑色に反射したようなエフェクトが掛かります。



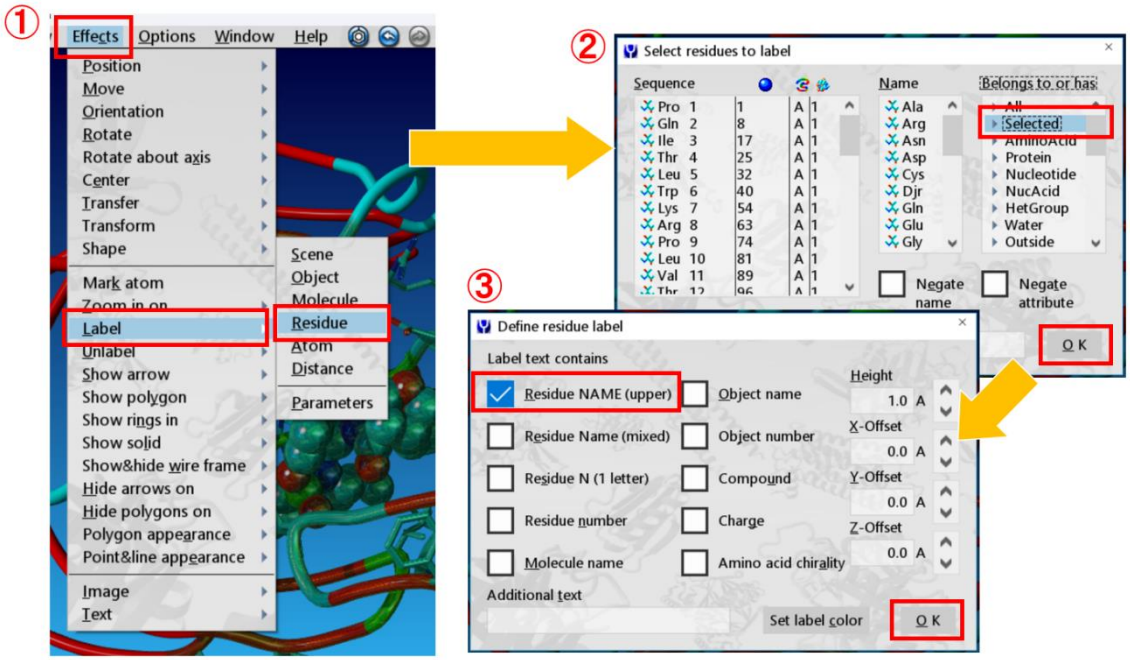
6. 選択部分の側鎖を表示するには、メニューバーから *Viwe*＞*Show atoms*＞*Residue sidechain* を選択します。すると選択ダイアログが表示されるので、右側の「Belongs to or has」欄から「Selected」をクリックし、「OK」ボタンを押します。
※選択ダイアログについては次の項目 2.7 選択ダイアログ（p. 20）に記載しています。



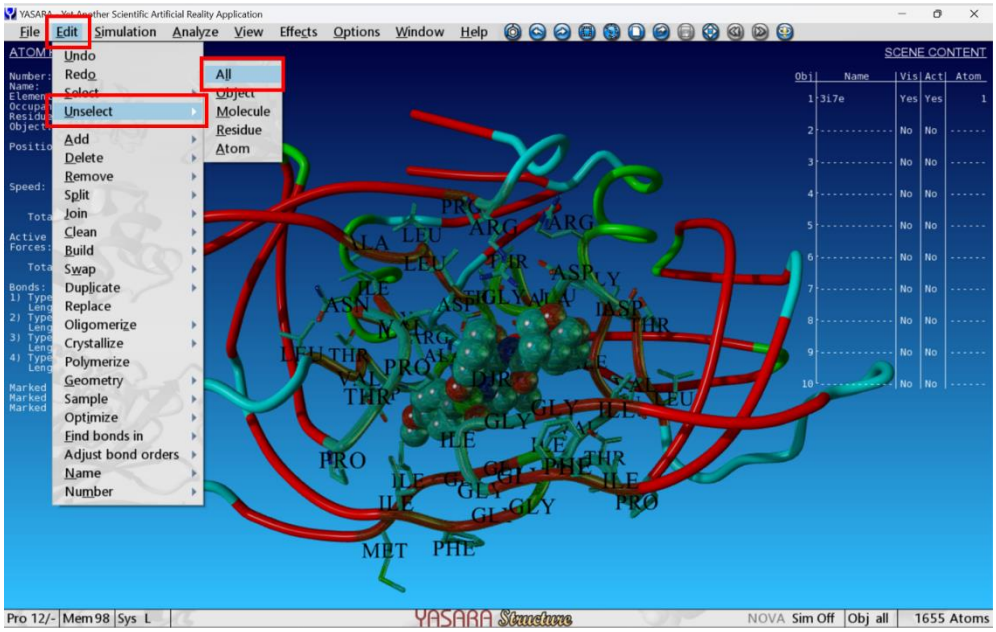
これでリガンド周辺のみに側鎖が表示されました。



7. 次に、リガンド周辺のアミノ酸残基（選択されている部分）にラベルを表示します。メニューバーから ***Effect*** > ***Label*** > ***Residue*** を選択し、先ほどと同様にダイアログボックスで「**Belongs to or has**」欄から「**Selected**」をクリックし、「**OK**」ボタンを押します。すると、ラベルに表示する内容の選択画面が表示されるので、表示したい項目（今回は残基名（大文字表記））にチェックを入れ、「**OK**」ボタンを押します。



8. 最後に、メニューバーから *Edit* > *Unselect* > *All* をクリックし、選択状態を解除すれば操作は終了です。



Tips：タンパク質二次構造の配色

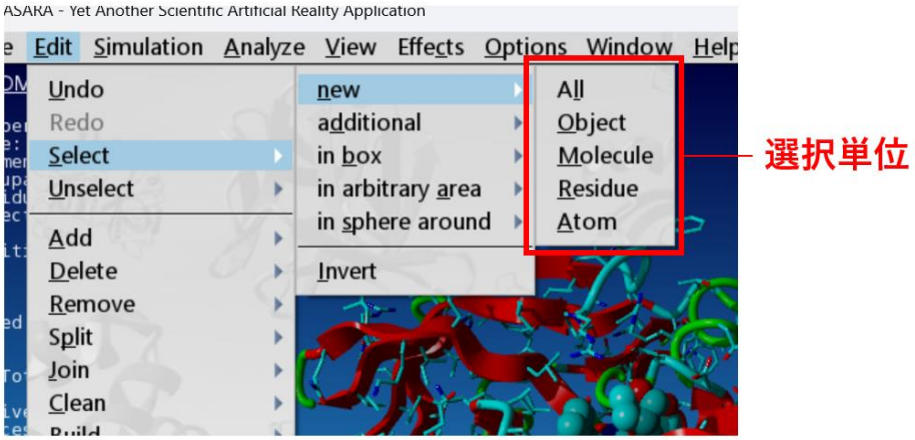
タンパク質構造を読み込むと、デフォルトでは二次構造に応じて以下の 5 種類に色分けされて表示されます。

α ヘリックス	青
β シート	赤
ターン	緑
3_{10} ヘリックス	黄
コイル	シアン

2.7　選択ダイアログ

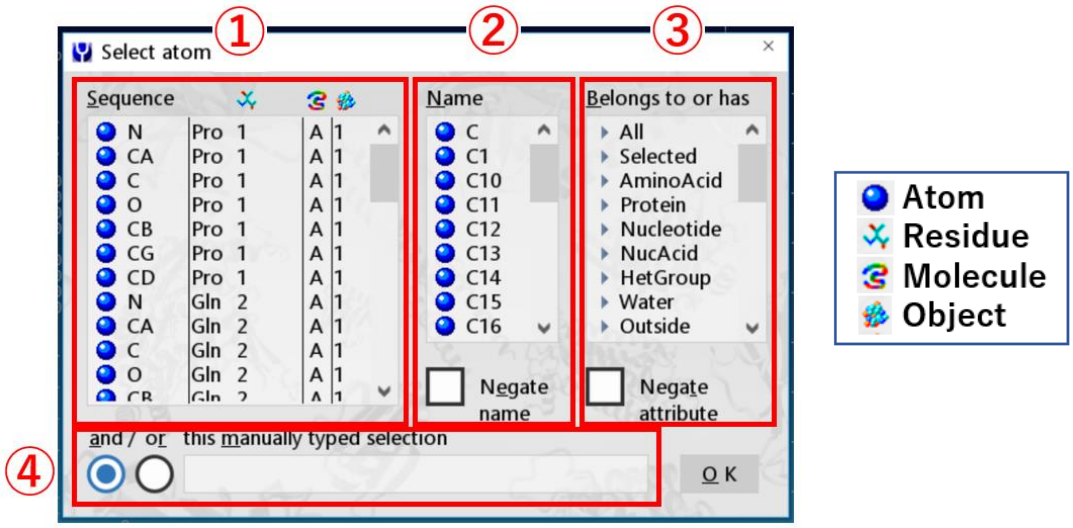
GUI で操作する際、操作対象（実行コマンドの対象）を選択するダイアログボックスが表示されることがあります。ダイアログの内容について、先ほどの Select コマンドを例に説明します。

メニューバーから ***Edit*** > ***Select*** > ***new*** を選択すると、**Atom** や **Residue** などの選択単位が表示されます。



これらは、最終的な選択単位となります。例えば、選択単位で Object を指定した場合、この後に表示される選択ダイアログでより小さな単位(例えば AminoAcid など)を選んでも、最終的にはそれらを含む Object 全体が対象となるので注意してください。

次のページに、**Atom** を選択単位に指定した場合の選択ダイアログの例を示します。ダイアログ内のアイコンについては図の右側を参照してください。各リスト内では Ctrl キーや Shift キーを押して複数選択することもできます。



① Sequence

指定した選択単位でのリストです。この例では Atom を選択単位に指定しているので、全原子のリストが表示されます。左から、原子名、残基名・残基番号、分子名、オブジェクト番号が記載されています。（上部のアイコンを参照）

② Name

指定した選択単位の名前ごとのリストです。この例では Atom を選択単位に指定しているので、原子名のリストが表示されます。

下の「**Negate name**」にチェックを入れると、リストで選択した名前以外が指定されます。

③ Belongs to or has

このリストからは様々な属性ごとに選択が可能です。

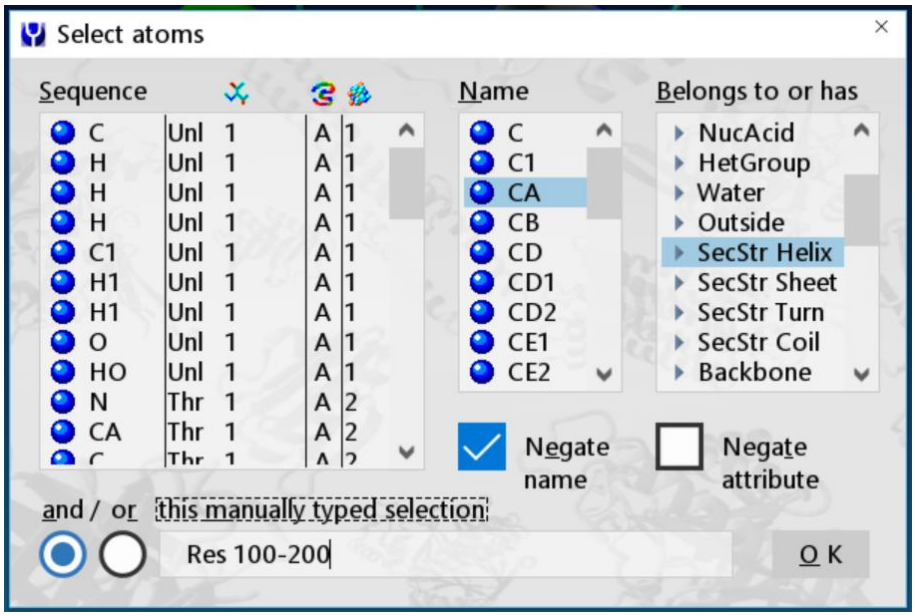
下の「**Negate attribute**」にチェックを入れると、リストで選択した属性以外が指定されます。

④ and / or this manually typed selection

上のリストで選択した内容に「and」または「or」で接続し、選択範囲をより細かく指定することができます。ボックスに入力できる内容や記入方法の詳細はユーザーマニュアルをご覧ください。

（ユーザーマニュアル ＞Selections-Tell YASARA what to take）

＜例＞



この選択ダイアログの例（Atom を選択単位に指定）では

・α炭素（Name：CA を選択）を除き（Negate name にチェック）、

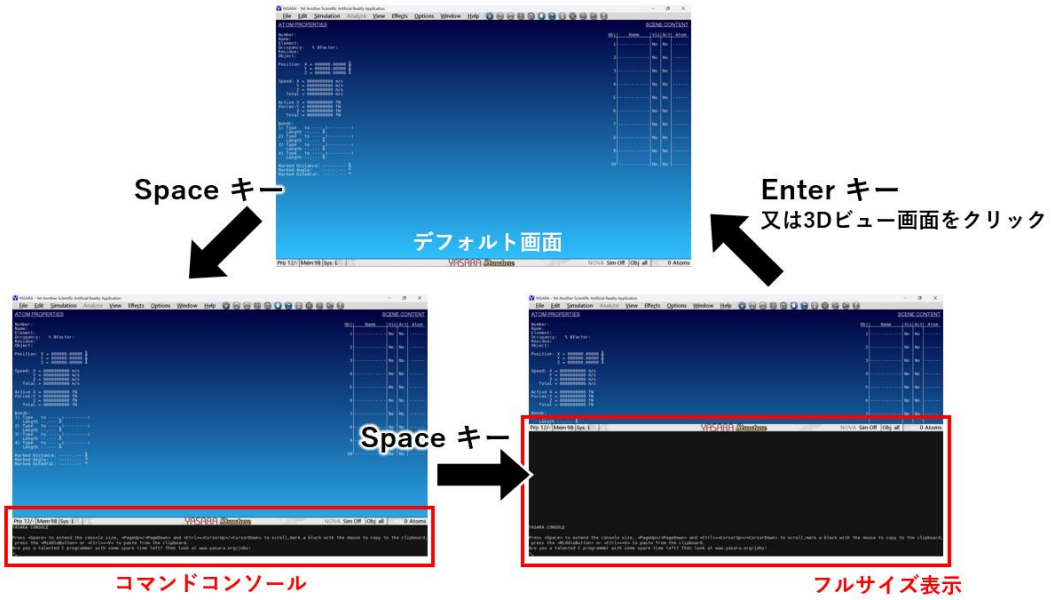
・二次構造が Helix に属しており（SeqStr Helix を選択）、

・さらに（and にチェック）、番号が 100 から 200 までの残基（and Res 100-200）に含まれる、

すべての原子が選択されます。

2.8　コマンドコンソール

スペースキーを押すと画面下部にコマンドコンソールが開き、もう一度スペースキーを押すとフルサイズで表示されます。
コマンドコンソール画面をしまうには、Enter キーを押すか、3D ビュー画面をクリックします。



コマンドの入力はここから行いますが、この文書では詳しい説明は省略します。
なお、コマンドの一覧は YASARA のユーザーマニュアルから確認できます。
（Commands-Tell YASARA what to do > Index-All commands in alphabetic order）
※ユーザーマニュアルの使い方は 3.3 ヘルプの活用（p. 31）をご覧ください。

GUI で操作している場合も、実際に実行されたコマンドをここから確認することができます。

3　YASARA の基本操作②

3.1　対応ファイル形式について

YASARA では、基本的には PDB 形式ファイル（.pdb）と、独自のファイル形式である YASARA Object（.yob）、YASARA Scene（.sce）に対応していますが、他のファイル形式* についても Openbabel を利用してファイルを変換することで利用することができます。

* Openbabel により利用可能なファイル形式については、付録に一覧表を記載しています。

＜YASARA 独自のファイル形式＞

✧　YASARA Object File（.yob）

YASARA Object (YOB）ファイルとは、YASARA で迅速に処理できるように記述されたバイナリファイル形式です。一つの Object だけを含む形式で、同等の PDB 形式ファイルよりもサイズが 50%ほど小さくなっています。また、PDB 形式では保存できないラベルや矢印などの情報も同時に保存することができます。

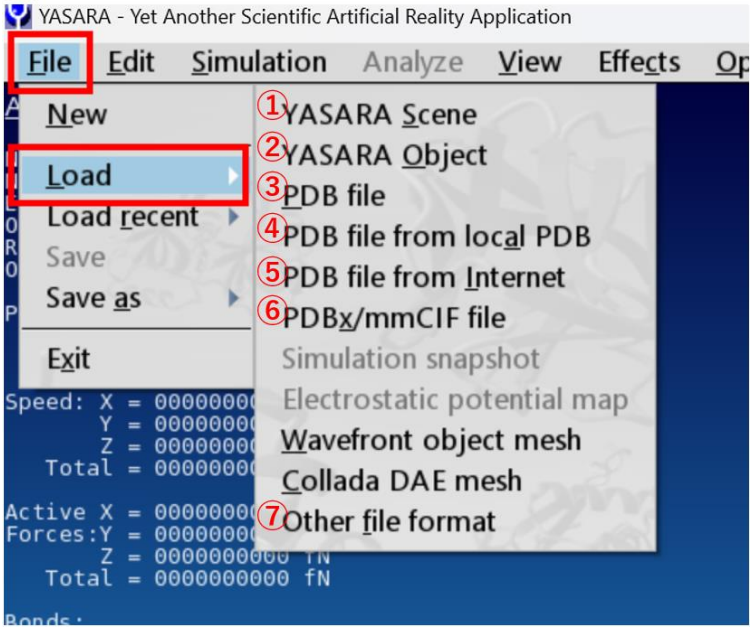
✧　YASARA Scene File (.sce)

YASARA Scene (SCE）ファイルとは、YASARA の Scene 全体の情報を記載することのできるバイナリファイル形式です。YOB ファイル同様、同等の PDB 形式ファイルよりもサイズが 50%ほど小さくなっています。一方で YOB 形式とは異なり、複数の Object を同じファイルに保存することが可能です。複数の化合物の同一ファイルへの保存だけでなく、化合物とシミュレーションセルを同一のファイルに保存することもできるため、シミュレーション用マクロの実行などでも重要となるファイル形式です。

3.2　ファイルのロードとセーブ

✧　ロード方法

GUI からファイルをロードするには、メニューバーから ***File*** > ***Load*** を選択し、ロードするファイル形式を選びます。



① YASARA Scene

YASARA Scene File (.sce)をロードする場合にクリックします。すると、ファイルの選択画面が表示されるので、目的のファイルをクリックし、**OK** ボタンを押します。右側のチェックボックス「**Include settings**」にチェックを入れると、背景色や光源、ball&stick モデルの半径など、表示スタイル関係の設定を含めてロードします。

② YASARA Object

YASARA Object File (.yob)をロードする場合にクリックします。ファイルの選択画面が表示されるので、目的のファイルをクリックし、**OK** ボタンを押します。

③ PDB file

コンピューター上の PDB ファイルをロードする場合にクリックします。圧縮された PDB ファイル(.pdb.gz)もロード可能です。ファイルの選択画面が表示されるので、目的のファイルをクリックし、**OK** ボタンを押します。右側のチェックボックス（オプション）の内容は以下になります。

＜オプション内容＞

❑ **Center object**

チェックすると、オブジェクトの中心が（ローカル座標*の）原点となるようにセンタリングされます。チェックを外すと、PDB ファイルのデカルト座標でロードされます。デフォルトでは有効に設定されています。

*付録の用語集を参照

❑ **Correct problems**

チェックすると、原子間距離に基づく共有結合の追加やシステイン架橋の生成など、構造の修正が行われます。デフォルトでは有効に設定されています。処理内容の詳細は、ユーザーマニュアルをご覧ください。

（Commands > File > PDB files > LoadPDB　4 段落目 If the Correct flag is～）

❑ **Include residues present in SEQRES sequence but not in structure**

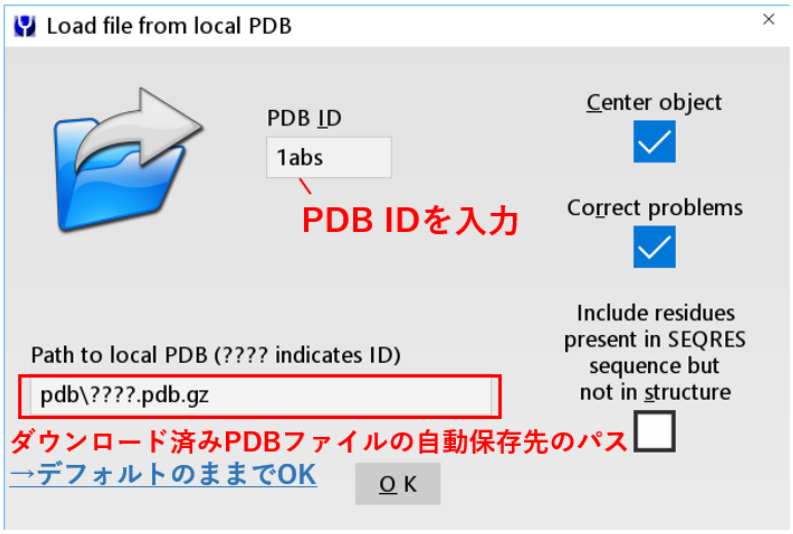
チェックすると、SEQRE レコード上に存在するものの構造中には存在しない残基を含めてロードします。

④ PDB file from local PDB

デフォルトの状態では、(次の⑤の操作で) 一度 WEB データベースからダウンロードされた PDB ファイルは、自動的に YASARA ホームディレクトリ上の”pdb”ディレクトリに gzip で圧縮された状態で保存されます。

「PDB file from local PDB」を選択すると、過去にダウンロードしたことがある PDB ファイルを、自動的に保存されたディレクトリ先から再度ロードすることができます。次に表示されるダイアログに、PDB ID を入力し、**OK** ボタンを押してください。

ダイアログ下方の「Path to local PDB」には、ダウンロードした PDB ファイルの自動保存先を入力しますが、デフォルトで入力されているので特に変更する必要はありません。



もし、自動保存先を変更したいのであれば、新規保存先のパスをここに入力して操作してください。すると次回以降、ダウンロードされた PDB ファイルが入力したパスに保存されるようになります。
右側のチェックボックスについては③に記載しています。

⑤ PDB file from Internet

Web データベースから PDB ファイルをロードする場合に選択します。
ダウンロード先として選択可能なのは以下の 2 サイトです。

・RCSB
・PDB_REDO

ダイアログが表示されたら、PDB ID とダウンロード先のサイトを選択して OK をクリックします。
右側のチェックボックスについては③に記載しています。
デフォルトの状態であれば、一度 WEB データベースからダウンロードされた PDB ファイルは、自動的に YASARA ホームディレクトリ上の”pdb”ディレクトリ内に gzip で圧縮された状態で保存されます。

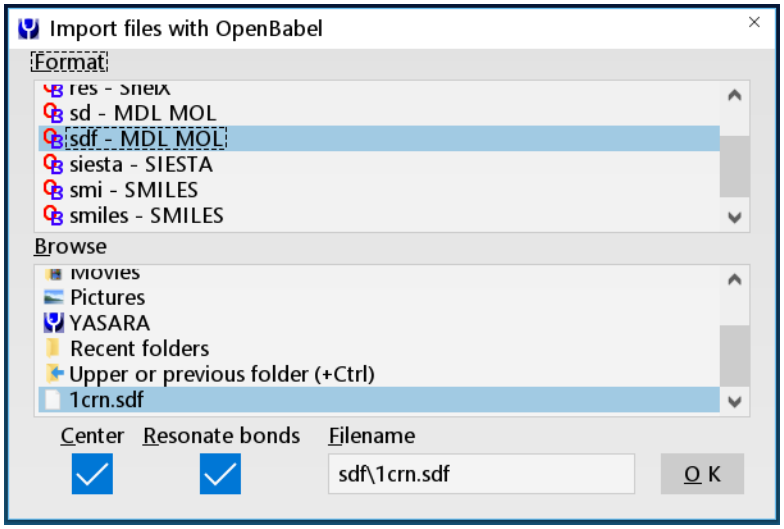
⑥ PDB x/mmCIF File

PDBx/mmCIF 形式のファイル*をロードする場合に選択します。
（*PDBx/mmCIF 形式の詳細については、PDBj のサイト（https://pdbj.org/info/new-format）などをご参照ください。）
YASARA では PDBx/mmCIF 形式に対応しており、ファイル変換の作業を行うことなくファイルを読み込むことが可能です。
ファイルの選択画面が表示されたら、目的のファイルをクリックし、**OK** ボタンを押します。右側のチェックボックスの説明は③に記載しています。

⑦ Other file format

上記以外のファイルをロードする場合に選択します。
基本的に上記以外のファイル形式には対応していませんが、Openbabel を利用することで他のファイル形式も YASARA で利用できるようになります。対応しているファイル形式の一覧を付録（p. 43）に記載しています。

ダイアログが表示されたら、ファイルの形式とコンピューター上のファイルを両方選択し、OK ボタンを押します。



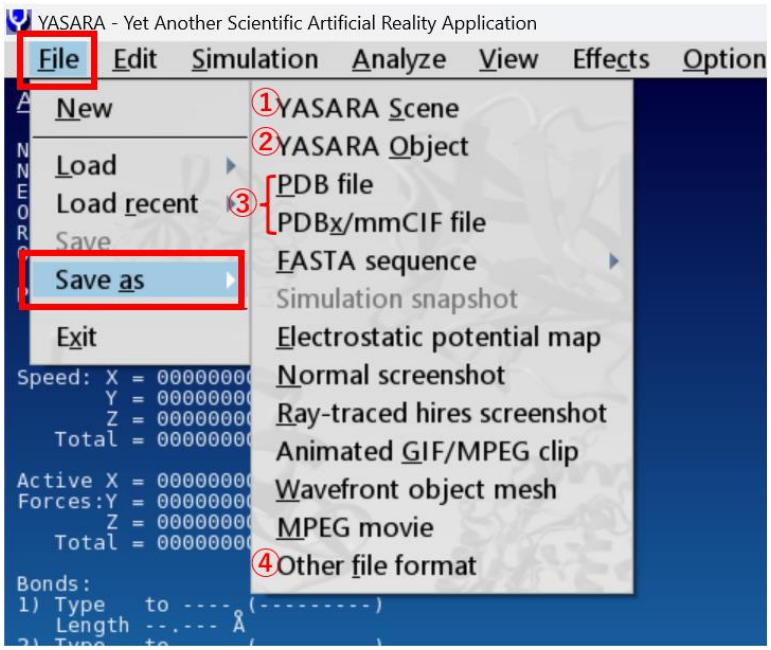
下のチェックボックス「**Center**」については③に記載しています。

「**Resonate bonds**」は結合次数の調整方法に関するオプションで、ファイル内に結合と結合次数の情報が含まれている場合は、チェックを入れると、分子内に交互に存在する単結合-二重結合を対応する共鳴形に置き換えます。デフォルトでは有効に設定されています。なお、チェックを外すとオリジナルの結合情報で表示されます。詳しくはユーザーマニュアルをご覧ください。

（Commands > File > OpenBabel > Load*　3 段落目 The Resonate flag～）

✧　セーブ方法

GUI からファイルをセーブするには、メニューバーから ***File*** > ***Save as*** を選択し、セーブするファイル形式を選びます。ここでは主なファイル形式（①～④）についてのみ記載します。このメニューからはその他、FASTA 形式での保存やスクリーンショットなどの保存が可能です。



① YASARA Scene

YASARA Scene File (.sce)として保存する場合にクリックします。現在 Scene 上に存在するすべての Object が一つにまとめて保存されます。ダイアログが表示されたら、保存先とファイル名を選択して **OK** ボタンを押します。

② YASARA Object

YASARA Object File (.yob)として保存する場合にクリックします。一つの Object しか保存することができないので、Object が複数ある場合には複数のファイルを作成するか、一つの Object にまとめる必要があります。ダイアログが表示されたら、保存する Object を指定し、保存先、ファイル名を選択して **OK** ボタンを押します。

③ PDB、PDBx/mmCIF

PDB File、PDB x/mmCIF File として保存する場合にクリックします。単一の Object が基本単位にはなりますが、複数の Object を保存することも可能です。ダ

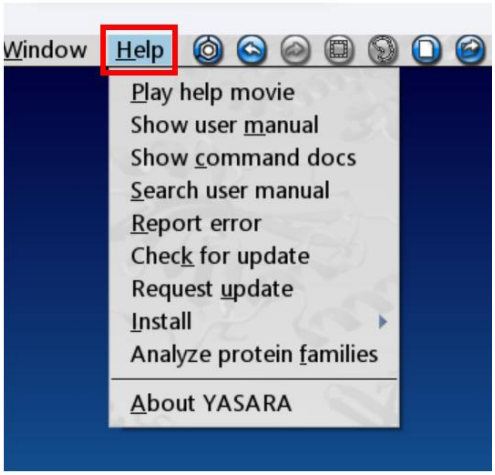
イアログボックス上で Ctrl キーや Shift キーを用いて複数の Object を選択したり、Object 名や分子の特徴によって選択したりすることができます。ダイアログが表示されたら、保存する Object を指定した後、保存先とファイル名を選択して保存します。
（ダイアログボックスの操作については、2.7 選択ダイアログ（p. 20）をご覧ください。）

④ Other file format

その他の形式で保存する場合にクリックします。Openbabel を用いることで様々な形式のファイルを作成することが可能です。ただし、単一の Object しか保存することができません。ダイアログが表示されたら、保存する Object とファイルの形式を選択し、保存先とファイル名を選択して保存します。
「**Transform**」にチェックを入れると、ローカル座標に適応された変更（センタリングなど）が取り消され、初期座標を保持して保存されます。
対応ファイル形式については付録（p. 45）に記載しています。

3.3　ヘルプの活用

最後に、YASARA のヘルプについて紹介します。YASARA にはインタラクティブなヘルプ動画と、HTML 形式のユーザーマニュアルが付属しています。メニューバーの ***Help*** から各項目を選択します。



✧　ヘルプ動画

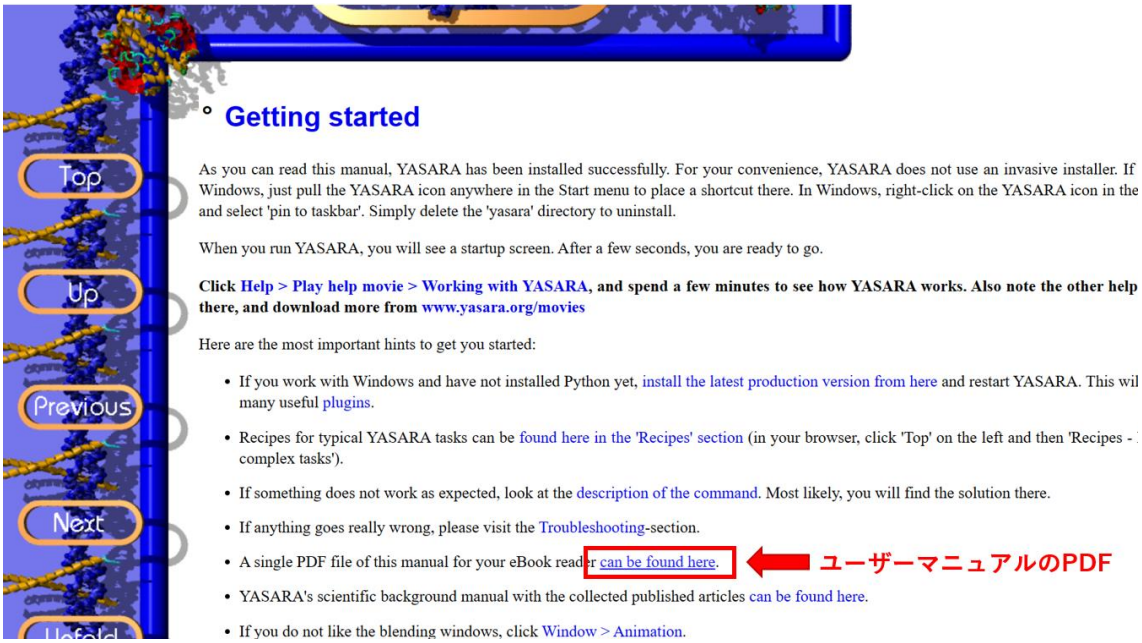
インタラクティブなヘルプ動画が付属しており、***Help*** > ***Play help movie*** から見ることができます。動画の目次が表示されるので、目的の項目をクリックし **OK** ボタンをクリックしてください。ヘルプ動画がスタートします。

✧　ユーザーマニュアル

Help > ***Show user manual*** をクリックすると、Web ブラウザが起動し、HTML 形式のユーザーマニュアルが開きます。

ユーザーマニュアルでは、見出しをクリックすると小見出しが表示されていきます。小見出しのタイトルをクリックするとそれぞれの内容のページに移りますが、上の見出しをもう一度クリックすると小見出しを全て含む内容を表示できるので、内容を概観したい場合に便利です。

また、ユーザーマニュアル内の **Essentials-What you really have to know** > **Getting started** の項目内からは PDF 版のマニュアルを入手できます。



✧　ユーザーマニュアル内の検索

HTML 形式のユーザーマニュアル内からは検索ができないので、YASARA 操作画面から、*Help* > *Show command docs*（コマンドの検索）または *Help* > *Search user manual*（キーワード検索）を選択し、ダイアログボックスに調べたい文字列を入力してください。

また、PDF 版のユーザーマニュアルから Ctrl+F キーで検索する方法もあります。

✧　YASARA を使い始める方に有用な項目

ユーザーマニュアルは非常に情報量が多く、初めは知りたい情報を探すのに苦労するかもしれません。そこで、次のページに YASARA を使い始める方に有用と思われる項目をいくつかピックアップしました。よろしければ参考にしてください。

- **Essentials-What you really have to know**
  - ✓ **Getting started**

    YASARA を使い始めるにあたって、ヘルプ動画の紹介、背景色の変え方、下部のステータス表示内容など、必要な情報が記載されています。
  - ✓ **The ten magic words**

    YASARA 内で重要な１０個の単語（Atom, Residue, Molecule, Object, Soup, Scene, All, Bond, Local coordinate system, Global coordinate system）についての説明が記載されています。
  - ✓ **The three potential pitfalls**

    注意が必要な 3 点、①Atom, Residue, Molecule などの包括関係、②'Hide', 'Switch off', 'Remove' ,'Delete'の違い、③PDB ファイルのギャップの自動結合、について記載されています。
  - ✓ **How to use keys, mouse and touch gestures**

    マウス・キーボード操作の一覧が記載されています。メニューバーのアイコンについてもこちらに記載されています。
  - ✓ **Screenshots as examples of what you can do**

    スクリーンショットの画像付きで、コマンドの例が記載されています。目的のコマンドを視覚的に探すことができます。

- **Selections-Tell YASARA what to take**

  コマンドを実行する際の対象の選択方法について細かく記載されています。
  - ✓ **Selection windows allow to build selections with the mouse**

    GUI で操作する場合に、セレクションウィンドウから操作の実行対象を選ぶ方法について記載されています。

- **Commands-Tell YASARA what to do**

  メニューバーの各項目について記載されています。
  - ✓ **Index-All commands in alphabetic order**

    コマンドの一覧が記載されています。

- **Recipes-Perform complex tasks**

  MD やドッキングなど、各種計算・シミュレーションの実行手順が記載されています。

おわりに

このマニュアルでは、YSARA を使うにあたって基本となる操作や情報を紹介しました。この後の実践的な操作方法については、ヘルプムービーやユーザーマニュアルが参考になります。特に、ユーザーマニュアルの **Recipes-Perform complex tasks** の項目では、MD 計算、ホモロジーモデリング、ドッキングシミュレーションなどの各種計算の実行手順や実行時のポイントなどが記載されているので便利です。

また、当社ホームページの YASARA 技術情報（https://www.affinity-science.com/yasara-tech/ もしくは、トップページから ソフトウェア＞創薬科学関連＞YASARA＞技術情報 を順次選択）には、本ガイドを含むチュートリアル文書（タンパク-リガンド・ドッキング計算など）を、よくある質問（FAQ）（https://www.affinity-science.com/yasara-faq/）には、わかりにくいポイントをまとめて公開しております。よろしければ、これらもあわせてご参照ください。

YASARA を皆様のご研究にお役立ていただけますと幸いです。

付録

用語集

✧　YASARA の基本用語	
Atom	YASARA における原子の表現。各 Atom には元素名（Element）の他に固有の名前（Name）と番号（Number）が振られている。また、各 Atom が含まれている Residue, Molecule, Object の情報も記載されている。
Residue	YASARA における**残基（原子の連続的な集合体）**の表現。各 Residue に Atom が格納されている。各 Residue には固有の名前（Name）と番号及びコード（Number, Insertion code）が振られている。
Molecule	YASARA における**分子（残基の連続的な集合体）**の表現。各 Molecule に Residue が格納されている。各 Molecule には固有の名前（Name）が振られている。
Object	**Molecule 及び追加アイテムの集合体**を表す（連続している必要なし）。各 Object に Molecule が格納されている。マウスやキーボードを用いて移動させることができる。追加アイテムとしては矢印やラベルなどの情報が含まれる。 アクティブ状態と非アクティブ状態を切り替えることができ、非アクティブ状態の Object は Soup から除かれる。 (切り替えは「Remove」コマンドと「Add」コマンドにて行う)
Soup	**アクティブな Object に含まれるすべての Atom** を意味する。矢印やラベルなどは含まれない。
Scene	アクティブであるか非アクティブであるかにかかわらず、**すべての Object をひとまとめにしたもの**を意味する。Scene として保存した場合、矢印やラベルなどを含む全 Object について、位置や向きも維持したまま保存することができる。
All	コマンドを実行するにあたって**指定可能なすべての対象**を意味する。 この時”All”が「全ての Object（Scene）」を指すか、「アクティブな Object 中の全ての Atom（Soup）」を指すかは、各コマンドによって異なる。
HUD	**Head Up Display** の略。YASARA 操作画面上に表示される情報のこと。 Insert キー or I キーにて HUD の表示非表示を切り替えられる。

Bond	pH 依存性に従って決定される **2 原子間の共有結合**のこと。YASARA では典型的な共有結合のみに”Bond”という語を用い、イオン結合や配位結合などは結合（Bond）として処理されない。結合次数は pH 依存性に基づき割り当てられる。
Local coordinate system	個々の Object に適応される座標系のこと。YASARA では、すべての Object が独自の **Local coordinate system（ローカル座標系）**を持つ。ローカル座標系は PDB ファイルで指定されるデカルト座標（直交座標）に対応している。 ファイル読み込みの際に’Center’オプションを無効にして（File > Load からロードする場合は右上の’Center object’ボックスのチェックを外して）ロードを行うと、個々の Atom のローカル座標は PDB ファイルのデカルト座標と完全に一致する。
Global coordinate system	Scene 全体に適応される座標系のこと。すべての Object は、YASARA の **Global coordinate system(グローバル座標系)**によって配置・方向付けがなされる。これらのグローバル座標は Object を移動または回転させると変化する。単一の Object を指定しない限りは、すべての Object は一つの座標を共通の中心として回転する。
✧ YASARA 独自のファイル形式	
YASARA Object File (.yob)	YASARA Object（YOB）ファイルとは、YASARA で迅速に処理できるように記述されたバイナリファイル形式です。**一つの Object** だけを含む形式で、同等の PDB 形式ファイルよりもサイズが 50%ほど小さくなっています。また、PDB 形式では保存できないラベルや矢印などの情報も同時に保存することができます。 YOB ファイルのロード… File > Load > YASARA Object YOB ファイルのセーブ… File > Save as > YASARA Object
YASARA Scene File (.sce)	YASARA Scene（SCE）ファイルとは、YASARA の Scene 全体の情報を記載することのできるバイナリファイル形式です。YOB ファイル同様、同等の PDB 形式ファイルよりもサイズが 50%ほど小さくなっています。一方で YOB 形式とは異なり、**複数の Object** を同じファイルに保存することが可能です。複数の化合物の同一ファイルへの保存だけでなく、化合物とシミュレーションセルを同一のファイルに保存することもできるため、シミュレーション用マクロの実行などでも重要となるファイル形式です。 SCE ファイルのロード… File > Load > YASARA Scene SCE ファイルのセーブ… File > Save as > YASARA Scene

マウス・キーボード操作一覧表

✧　**オブジェクトの移動（Key）**	
Shift	**操作対象 Object の変更**（1 つ**進む**［ 例：Obj all → Obj 1 → Obj 2 → Obj 3… ］）
Ctrl + Shift	操作対象 Object の変更（1 つ**戻る**）
カーソルキー	X/Y 軸方向への Object の移動
1~9（テンキー不可）	Object 及び Scene **移動速度**の変更（1:遅～9:速）
Ctrl + 1~9（テンキー不可）	Object 及び Scene **回転速度**の変更（1:遅～9:速）
Q, W, E, R, T, Y	Object 及び Scene の**移動**（Q･W=X 軸方向，E･R=Y 軸方向，T･Y=Z 軸方向）
A, S, D, F, G, H	Object 及び Scene の**回転**（A･S=X 軸中心，D･F=Y 軸中心，G･H=Z 軸中心）
Z, X, C, V, B, N	Object 及び Scene の**自動回転**（Z･X=X 軸中心，C･V=Y 軸中心，B･N=Z 軸中心）
✧　**オブジェクトの移動（マウス）**	
左ドラッグ + マウス移動	Object 及び Scene の X/Y 軸方向での回転
Ctrl + 左ドラッグ + マウス移動	選択中の原子を中心とした Object 及び Scene の X/Y 軸方向での回転
左右ドラッグ(同時) + マウス移動	Object 及び Scene の X/Y 軸方向への移動（※ホイールボタンをドラッグしても同様）
右ドラッグ + マウス移動	Object 及び Scene の Z 軸方向への移動
[ラベル上で]左クリック	ラベルの選択
Ctrl + 右ドラッグ + マウス移動	マークされたラベルのサイズ変更
[ラベル上で]ホイールボタンクリック	ラベルの向きをデフォルトにリセット

✧　**Scene スタイルの変更**	
F1 or Alt+1	Scene スタイルを”**ball**”に変更
F2 or Alt+2	Scene スタイルを”**ball & stick**”に変更
F3 or Alt+3	Scene スタイルを”**stick**”に変更
F4 or Alt+4	Scene スタイルを”**Calpha trace**”に変更
F5 or Alt+5	Scene スタイルを”**tube**”に変更
F6 or Alt+6	Scene スタイルを”**ribbon**”に変更
F7 or Alt+7	Scene スタイルを”**cartoon**”に変更
F8 or Alt+8	**側鎖の表示**切り替え［hide → stick → ball&stick］
HUD 上の”Visibility”列を左クリック	クリックした Object 等の表示・非表示の切り替え
HUD 上の”Visibility”列を右クリック	クリックした Object 等のみを表示し、その他はすべて非表示に変更
✧　**編集**	
Delete	マークした Atom やラベルの削除
Alt+左クリック（個別の Atom）	最後のコマンドの繰り返し（デフォルトが KDE の場合は代わりに Tab を使用）
Alt+左クリック（**sequence selector 上**）	最後のコマンドの繰り返し（デフォルトが KDE の場合は代わりに Tab を使用）
Ctrl+Z or Ctrl+U	操作を一つ**戻す**（Undo）
Ctrl+R	操作を一つ**進める**（Redo）

✧　Soup の分析	
Insert or I	HUD（head up display）の表示・非表示切り替え
Ctrl+Insert or Ctrl+I	右 HUD の表示情報切り替え
左クリック(個別の Atom)	Atom をマークする（HUD にプロパティが表示される）
左クリック (sequence selector 上)	クリックした Residue 中の Atom をマークする
PageDown or ホイールボタン下回転	現在マークしている Atom の、一つ次の番号の Atom をマークする
PageUp or ホイールボタン上回転	現在マークしている Atom の、一つ前の番号の Atom をマークする
Ctrl+左クリック (複数の Atom)	マークされた原子の距離(distance)・角度(angle)・二面角(dihedral)の情報を表示
Ctrl+左クリック (sequence selector 上)	クリックした Residue へズームする
Ctrl+右クリック (個別の Atom)	Atom 向けコンテクストメニューの表示
Ctrl+右クリック (sequence selector 上)	Residue 向けコンテクストメニューの表示
Home	一つ前の charge 及び bond の概要を表示する（simulation HUD）
End	一つ後の charge 及び bond の概要を表示する（simulation HUD）
[sequence selector 上] 任意の英字キー	入力された文字（1 文字）に対応するアミノ酸を Residue 中から探索する （ポインタが sequence selector 上にある時のみ有効）
[sequence selector 上] Ctrl+V	クリップボード上の文字に対応するアミノ酸を Residue 中から探索する （ポインタが sequence selector 上にある時のみ有効）

✧ **低分子 Building モード** YASARA トップメニューにあるベンゼン環の形をしたボタン（  ）をクリックすると低分子 Building モードに切り替わり、以下のキー操作が有効になります。	
H	マークされている Atom を「**水素**(hydrogen)」に変更
C	マークされている Atom を「**炭素**(carbon)」に変更
N	マークされている Atom を「**窒素**(nitrogen)」に変更
O	マークされている Atom を「**酸素**(oxygen)」に変更
F	マークされている Atom を「**フッ素**(flourine)」に変更
P	マークされている Atom を「**リン**(phosphorus)」に変更
S	マークされている Atom を「**硫黄**(sulfur)」に変更
I	マークされている Atom を「**ヨウ素**(iodine)」に変更
2 つの Atom をクリックで指定(マーク)している場合	
1	マークされた Atom 間の Bond を”**single bond**”に変更
2	マークされた Atom 間の Bond を”**double bond**”に変更
3	マークされた Atom 間の Bond を”**triple bond**”に変更
4	マークされた Atom 間の Bond を”**quadruple bond**”に変更
5	マークされた Atom 間の Bond を”**resonance bond with order 1.5**”に変更
C	マークされた Atom 間に**炭素ブリッジ**を作成
N	マークされた Atom 間に**窒素ブリッジ**を作成
O	マークされた Atom 間に**酸素ブリッジ**を作成
P	マークされた Atom 間に**リンブリッジ**を作成
S	マークされた Atom 間に**硫黄ブリッジ**を作成

✧　シミュレーション制御	
F9 or Alt+9	全エネルギーの計算、及び HUD(simulation parameters)への結果表示
F10 or 0	シミュレーション温度管理の変更（一つ進む）
Ctrl+F10 or Ctrl+0	シミュレーション温度管理の変更（一つ戻る）
F11 or 0 の一つ右側のキー	シミュレーションの一時停止
Ctrl+F11	一時停止中のシミュレーションを 1 ステップだけ進める
F12 or 0 の二つ右側のキー	シミュレーションの実行・停止の切り替え
1~9 (テンキー不可)	引き寄せる強さの変更（1:弱～9:強）
Ctrl+右ドラッグ	マークしている原子をマウスポインタの方向に引き寄せる（シミュレーション中）
Ctrl+左右ドラッグ	マークしている原子を含む Object をマウスポインタの方向に引き寄せる（シミュレーション中）
Ctrl+ ホイールボタンドラッグ	マークしている原子を含む Object をマウスポインタの方向に引き寄せる（シミュレーション中）
✧　コンソールの使用	
スペースキー	コンソールを展開する
スペースキー（二回連続）	コンソール画面をフルサイズにする
リターン（エンター）キー	（何も入力していない状態の場合）コンソールを閉じる
マウス左ボタン	テキストの選択、およびクリップボードへのコピー
Ctrl+A	全テキストの選択、およびクリップボードへのコピー
ホイールボタンクリック	クリップボードのテキストを貼り付ける
Ctrl+V	クリップボードのテキストを貼り付ける
PageUp	コンソールを 1 ページ下げる
PageDown	コンソールを 1 ページ上げる
ホイールボタン上回転	コンソールを半ページ下げる
ホイールボタン下回転	コンソールを半ページ上げる
Ctrl+上カーソルキー	コンソールを一行だけ下げる
Ctrl+下カーソルキー	コンソールを一行だけ上げる
上カーソルキー	コマンド履歴から一つ前のものを表示する
下カーソルキー	コマンド履歴から一つ後のものを表示する
Home	カーソルをラインの最初に移動
End	カーソルをラインの最後に移動
Ins	HUD の表示・非表示切り替え
Ctrl+Ins	HUD の表示項目切り替え

✧　その他	
Pause or P	YASARA の一時停止
Ctrl+Pause or Ctrl+P	一時停止中の YASARA を 1 ステップだけ進める
Ctrl+M	最後のマクロまたはムービーを再実行

ロード可能なファイル形式一覧（OpenBabel 利用）

abinit	ABINIT Output Format
acesout	ACES output format
acr	ACR format
adfout	ADF output format
alc	Alchemy format
aoforce	Turbomole AOFORCE output format
arc	Accelrys/MSI Biosym/Insight II CAR format
axsf	XCrySDen Structure Format
bgf	MSI BGF format
box	Dock 3.5 Box format
bs	Ball and Stick format
c09out	Crystal 09 output format
c3d1	Chem3D Cartesian 1 format
c3d2	Chem3D Cartesian 2 format
caccrt	Cacao Cartesian format
can	Canonical SMILES format
car	Accelrys/MSI Biosym/Insight II CAR format
castep	CASTEP format
ccc	CCC format
CONFIG	DL-POLY CONFIG
CONTCAR	VASP format
CONTFF	MDFF format
crk2d	Chemical Resource Kit diagram(2D)
crk3d	Chemical Resource Kit 3D format
ct	ChemDraw Connection Table format
cub	Gaussian cube format
cube	Gaussian cube format

dallog	DALTON output format
dalmol	DALTON input format
dat	Generic Output file format
dmol	DMol3 coordinates format
exyz	Extended XYZ cartesian coordinates format
fch	Gaussian formatted checkpoint file format
fchk	Gaussian formatted checkpoint file format
fck	Gaussian formatted checkpoint file format
feat	Feature format
fhiaims	FHIaims XYZ format
fract	Free Form Fractional format
fs	Fastsearch format
g03	Gaussian Output
g09	Gaussian Output
g92	Gaussian Output
g94	Gaussian Output
g98	Gaussian Output
gal	Gaussian Output
gam	GAMESS Output
gamess	GAMESS Output
gamin	GAMESS Input
gamout	GAMESS Output
got	GULP format
gpr	Ghemical format
gro	GRO format
gzmat	Gaussian Z-Matrix Input
hin	HyperChem HIN format
HISTORY	DL-POLY HISTORY
inp	GAMESS Input

ins	ShelX format
jin	Jaguar input format
jout	Jaguar output format
log	Generic Output file format
lpmd	LPMD format
mcdl	MCDL format
MDFF	MDFF format
mdl	MDL MOL format
ml2	Sybyl Mol2 format
mmd	MacroModel format
mmod	MacroModel format
mol	MDL MOL format
mol2	Sybyl Mol2 format
mold	Molden format
molden	Molden format
molf	Molden format
moo	MOPAC Output format
mop	MOPAC Cartesian format
mopcrt	MOPAC Cartesian format
mopin	MOPAC Internal
mopout	MOPAC Output format
mpc	MOPAC Cartesian format
mpo	Molpro output format
mpqc	MPQC output format
msi	Accelrys/MSI Cerius II MSI format
nwo	NWChem output format
out	Generic Output file format
outmol	DMol3 coordinates format
output	Generic Output file format
pcm	PCModel Format
pdbqt	AutoDock PDBQT format

pos	POS cartesian coordinates format
POSCAR	VASP format
POSFF	MDFF format
pqr	PQR format
pqs	Parallel Quantum Solutions format
prep	Amber Prep format
pwscf	PWscf format
qcout	Q-Chem output format
res	ShelX format
sd	MDL MOL format
sdf	MDL MOL format
siesta	SIESTA format
smi	SMILES format
smiles	SMILES format
smy	SMILES format using Smiley parser
sy2	Sybyl Mol2 format
t41	ADF TAPE41 format
tdd	Thermo format
text	Read and write raw text
therm	Thermo format
tmol	TurboMole Coordinate format
txt	Title format
txyz	Tinker XYZ format
unixyz	UniChem XYZ format
VASP	VASP format
vmol	ViewMol format
xsf	XCrySDen Structure Format
xyz	XYZ cartesian coordinates format

セーブ可能なファイル形式一覧（OpenBabel 利用）

acesin	ACES input format
adf	ADF cartesian input format
alc	Alchemy format
ascii	ASCII format
bgf	MSI BGF format
box	Dock 3.5 Box format
bs	Ball and Stick format
c3d1	Chem3D Cartesian 1 format
c3d2	Chem3D Cartesian 2 format
cac	CAChe MolStruct format
caccrt	Cacao Cartesian format
cache	CAChe MolStruct format
cacint	Cacao Internal format
can	Canonical SMILES format
cht	Chemtool format
com	Gaussian Input
CONFIG	DL-POLY CONFIG
CONTCAR	VASP format
CONTFF	MDFF format
copy	Copy raw text
crk2d	Chemical Resource Kit diagram(2D)
crk3d	Chemical Resource Kit 3D format
csr	Accelrys/MSI Quanta CSR format
cssr	CSD CSSR format
ct	ChemDraw Connection Table format
cub	Gaussian cube format
cube	Gaussian cube format
dalmol	DALTON input format
dmol	DMol3 coordinates format

exyz	Extended XYZ cartesian coordinates format
fh	Fenske-Hall Z-Matrix format
fhiaims	FHIaims XYZ format
fix	SMILES FIX format
fps	FPS text fingerprint format (Dalke)
fpt	Fingerprint format
fract	Free Form Fractional format
fs	Fastsearch format
gamin	GAMESS Input
gau	Gaussian Input
gjc	Gaussian Input
gjf	Gaussian Input
gpr	Ghemical format
gr96	GROMOS96 format
gro	GRO format
gzmat	Gaussian Z-Matrix Input
hin	HyperChem HIN format
inp	GAMESS Input
jin	Jaguar input format
lmpdat	The LAMMPS data format
lpmd	LPMD format
mcdl	MCDL format
MDFF	MDFF format
mdl	MDL MOL format
ml2	Sybyl Mol2 format
mmd	MacroModel format
mmod	MacroModel format
mna	Multilevel Neighborhoods of Atoms (MNA)
mol	MDL MOL format
mol2	Sybyl Mol2 format

mold	Molden format
molden	Molden format
molf	Molden format
molreport	Open Babel molecule report
mop	MOPAC Cartesian format
mopcrt	MOPAC Cartesian format
mopin	MOPAC Internal
mp	Molpro input format
mpc	MOPAC Cartesian format
mpd	MolPrint2D format
mpqcin	MPQC simplified input format
msms	M.F. Sanner's MSMS input format
nul	Outputs nothing
nw	NWChem input format
outmol	DMol3 coordinates format
paint	Painter format
pcm	PCModel Format
pdbqt	AutoDock PDBQT format
pdbqtr	AutoDock PDBQT format, rigid without branches
pointcloud	Point cloud on VDW surface
POSCAR	VASP format
POSFF	MDFF format
pov	POV-Ray input format
pqr	PQR format
pqs	Parallel Quantum Solutions format
qcin	Q-Chem input format
report	Open Babel report format
sd	MDL MOL format
sdf	MDL MOL format
sdf2	MDL MOL 2000 format
smi	SMILES format

smiles	SMILES format
stl	STL 3D
svg	SVG 2D depiction
sy2	Sybyl Mol2 format
tdd	Thermo format
text	Read and write raw text
therm	Thermo format
tmol	TurboMole Coordinate format
txt	Title format
txyz	Tinker XYZ format
unixyz	UniChem XYZ format
VASP	VASP format
vmol	ViewMol format
xed	XED format
xyz	XYZ cartesian coordinates format
zin	ZINDO input format