

使用法

1. 蛋白質の1次構造データを用意する。
 - アミノ酸配列は1文字コード、3文字コードのどちらでもよい(Numberコードはオリジナルなので推奨しない)
 - 拡張子は「DAT」
2. VolumeCalc1.exe を実行し、以下の質問に答えていく
3. 「D 化試料ですか？」⇒Yes なら「Y」(→4へ)/No なら「N」(→5へ)
4. 「Please input protein deuteration ratio(percent)」⇒%単位で重水素化率を入力
5. 「Please input ratio of D2O (percent)」⇒%単位で溶媒の重水比率を入力
6. 「読み込む残基情報ファイルの path は、カレントディレクトリで良いですか？」⇒Yes なら「Y」(→*へ)/違う場合は「N」(→7へ)
：通常は面倒なので Program と残基情報ファイルは同じディレクトリに置いておく
7. 読み込む残基情報ファイルの path を入力してください⇒指示に従って入力
8. 確認が来るので、正しければ「Y」(→9へ)/間違えたなら「N」(→7に戻る)
9. 読み込む残基情報ファイル名を入力してください⇒拡張子抜きで入力する
10. 無事ファイル名が確認で来たら、

*.DAT をオープンできました。
データを読み込みます。
Data code?

と聞いてくるので、Data code の種類を 0,1,2 から選んで、その数字を打ち込んでY
11. 結果を表示したのち、終了して良いかと聞いてくるので「Y」
12. (残基情報ファイル名)_重水比率[(重水素化比率)D].DAT という結果を書き込んだファイルが出来る。

例

残基情報ファイル : Lysozyme.DAT

計算結果ファイル : Lysozyme_80_30D.DAT(重水比率 : 80%、重水素化率 30%)