

MOLDA Qulis: 生命科学研究のための分子モデリングプログラム

○吉田 弘

広島大学大学院理学研究科 (〒739-8526 東広島市鏡山 1-3-1)

【緒言】我々は1998年にJava3Dを用いることによりプラットフォームに依存しないで高品質なグラフィックスを可能にする分子モデリングプログラムMOLDA for Javaを報告した¹⁾。しかし、このプログラムでは分子モデリング部分とグラフィックス部分とが分離し、またJava3Dの描画速度の問題から操作性が問題となっていた。本研究では、タンパク質のモデリング機能をもつMOLDA for Protein Modeling²⁾にOpenInventorのJavaクラスを組み込むことにより、VRML形式のデータの読み込みと加工を行うことでシーングラフベースでの分子モデリングを可能とするMOLDA Qulis (MOLDA for Quantum Life Sciences)を開発したので報告する。

【方法】MOLDA Qulisは、3Dグラフィックス部分はTGS社のOpenInventorのクラスを用いることで数千原子を含むタンパク質をPCで速度的に問題なく取り扱うことができる。

【結果】MOLDA Qulisは、アミノ酸のシーケンスを入力することにより任意のコンホメーションをもつポリペプチドの三次元構造を生成する機能やポイントミュテーションなどアミノ酸残基ごとの編集を可能にする機能、さらには分子ドッキングの機能をもつ(図1)。また、MOLDA形式のデータを用いてモデリングを行うことが可能であると同時にVRMLファイルを読み込んでそれを同じ画面上に表示し独立に操作することができる。さらに、空間充填型モデル、球棒モデル、ドライディングモデルおよびラインモデルを、指定したアミノ酸残基ごとや、主鎖と側鎖に分けて表示することができる(図2)。これらのモデリング機能やグラフィックス機能により、タンパク質中の薬物設計が容易になり、Structure-based Drug Designへの応用が期待できる。

【謝辞】本プログラムの開発は、情報処理振興事業協会の平成14年度未踏ソフトウェア創造事業『第一原理に基づいた分子言語による生命プログラミング』の一環として行っており、OpenInventorによるグラフィックスについては株式会社マックスネットの協力を得た。

【参考文献】

- 1) H. Yoshida, R.S. Rzepa and A.P. Tonge, *J. Mol. Graph. Mod.*, **16**, 144 (1998).
- 2) 吉田 弘, 日本コンピュータ化学会 2002 秋季年会, 201, 2002 年.

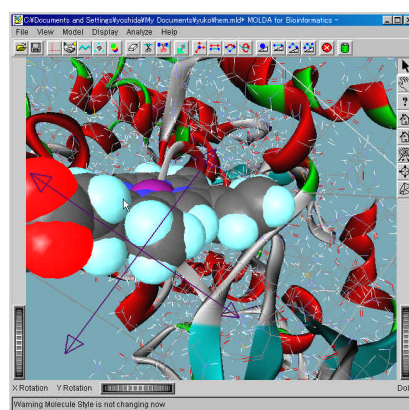


図1 .MOLDA Qulis でタンパク質の中にヘムをドッキングさせるところ

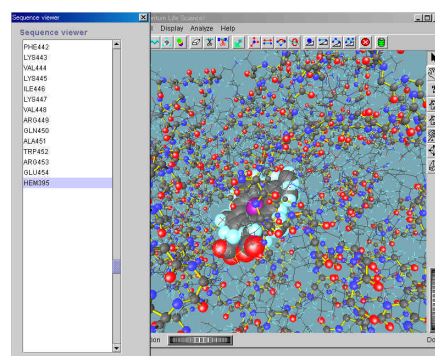


図2 . 指定した残基を空間充填型モデルで表示し、さらに主鎖を球棒モデル、側鎖をラインモデルで表示したもの