

特別 2

| | | |
|--|---|---|
| 演 題 | タンパク質相互作用可視化ビューワ：Biostation Viewer - フラグメント分子軌道法を使って - | |
| 発 表 者 (所 属) | みずほ情報総研株式会社 (旧株式会社 富士総合研究所) 情報科学技術センター 加藤 昭史 | |
| 連 絡 先 | 〒101 - 8443 東京都千代田区神田錦町 2 - 3 Tel 03(5281)5323 Fax 03(5281)5331 kato@ccse.fuji-ric.co.jp | |
| キ ー ワ ー ド | 分子グラフィックス、可視化、相互作用、フラグメント | |
| 開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど | タンパク質を適当なフラグメントに分割し、そのフラグメント間の相互作用を計算し、計算結果を可視化することにより残基間相互作用や医薬品と受容体タンパク質の残基との相互作用などを詳細に解析することを目標としている。 | |
| 環 境 | 適 応 機 種 名 | PC,ワークステーション |
| | O S 名 | Windows, Linux, Unix |
| | ソ ー ス 言 語 | Java, Java3D |
| | 周 辺 機 器 | グラフィックカード推奨 |
| 流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い) | <ul style="list-style-type: none"> ・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ◎独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ・未定 | 具 体 的 方 法 |
| | | http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/ よりダウンロード可能 |

タンパク質相互作用可視化ビューワ : Biostation Viewer

- フラグメント分子軌道法を使って -

加藤 昭史

みずほ情報総研株式会社 (旧株式会社 富士総合研究所)

1. はじめに

我々のグループでは、フラグメント分子軌道法に基づいて生体高分子を精度良く高速に計算するプログラム ABINIT-MP^[1]の開発を行っている。生体高分子の量子化学計算は世界でも殆ど類がなく、その計算結果を解析するためには独自の可視化ツールの開発が不可欠である。今回、この目的を実現する可視化ツール BioStation Viewer を開発したので報告する。

BioStation Viewer は移植性を考慮し Java, Java3D を使用し開発されており、<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>よりプログラム、ドキュメントがダウンロード可能である。

2. 主な機能

他の可視化ツールを紹介しながら、BioStation Viewer の設計思想、機能等を紹介する。主な機能を以下に示す。フラグメント間相互作用解析の表示が他には無い BioStation Viewer 独自の機能である。入力ファイルとして Gaussian Cube 形式のファイルをサポートし、結晶系のナノシミュレーションの解析結果表示ビューワとしても使用されている。

主な機能を以下に示す。

- 1) タンパク質の分子構造の表示
- 2) 電子密度、静電ポテンシャル、分子軌道の等値面、断面表示
- 3) 電子密度等値面上に静電ポテンシャルの値による色付けした表示
- 4) 分子構造の編集
- 5) フラグメント間相互作用解析の表示
- 6) 電場ベクトルの表示
- 7) 分子構造の時系列変化のアニメーション表示
- 8) 分子間距離、角度等のモニタリング機能

3. 表示例

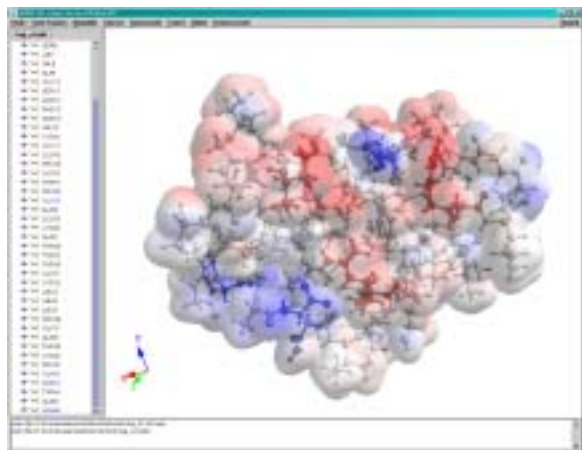


図1 Crambin(PDB ID:1EJG)の電子密度(0.001e/Bohr³)の等値面上に静電ポテンシャルの値で色付けし半透明表示

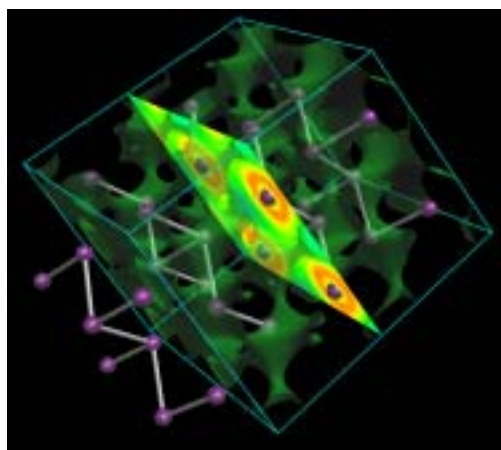


図2 Bi 超薄膜(4層)の等電子密度面と断面表示

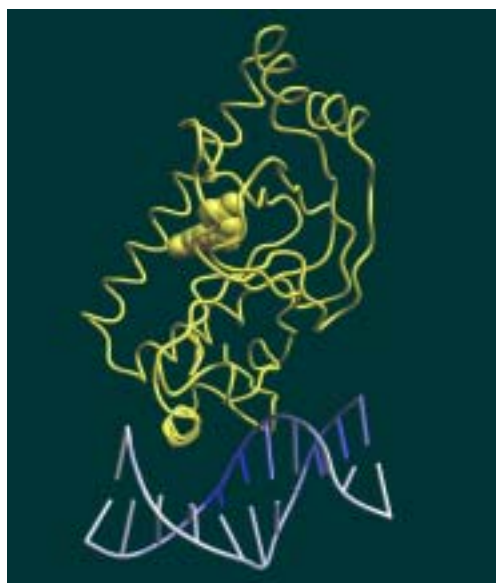


図3 タンパク質とDNAの相互作用表示

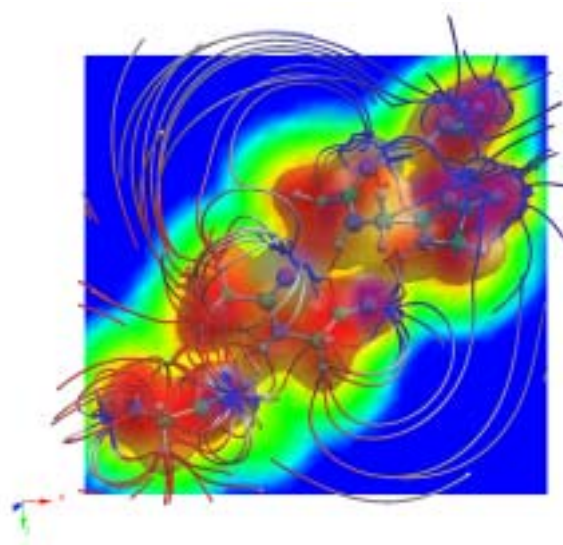


図4 グリシンの電場ベクトル表示

4. 今後の課題

計算部は、タンパク質をフラグメントに分割し計算する手法であり、金属を含んだ酵素反応や光励起反応なども扱えるよう手法の開発も予定されており、また、計算リソースの進歩により、千残基程度のより大規模な系の計算が可能となってきている。このような大規模な計算結果をいかにわかりやすく可視化していくかが今後の課題となる。

[1] T.Nakano, T.Kaminuma, T.Sato, K.Fukuzawa, Y.Akiyama, M.Uebayasi, K.Kitaura, Chem. Phys. Lett. 351 (2002) 475-480.