

## RD01

### MOLDA QuLiS の 3D グラフィックス機能の強化

吉田 弘<sup>1,2</sup>, 古地利光<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 広島大学大学院理学研究科 (〒739-8526 東広島市鏡山 1-3-1)

<sup>2</sup> 広島大学量子生命科学プロジェクト研究センター (〒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<sup>1)</sup>, さらに, シーングラフベースでのタンパク質モデリングを可能とするためにOpenInventorを用いた, MOLDA QuLiS (MOLDA for Quantum Life Sciences)を報告した<sup>2)</sup>. 今回は, このMOLDA QuLiSの3Dグラフィックスの機能を拡張することにより, タンパク質モデリングの操作性を強化したので報告する。

【結果】今回強化された機能には次のものがある。

(1) タンパク質と基質部分の表示識別機能の強化:

MOLDA QuLiSが, 他の同様な目的をもったタンパク質グラフィックスソフトと異なる点は分子のドッキング機能である。この機能を有することによりMOLDA QuLiSは, Structure Based Drug Design (SBDD)に基づいたドラッグデザインにおける強力なツールとなる。今回の改良により, タンパク質部分と基質部分との表示方法を完全に分離させることができるようになった。さらにタンパク質部分の表示も注目する残基部分を強調することができるようになりSBDDによる設計機能が強化された (図 1)。

(2) リボン表示等のグラフィックス機能の強化:

MOLDA QuLiSはもともと計算化学プログラムとのインターフェースとして開発したものであるが, 今回, リボン表示等のタンパク質グラフィックス機能を実装した (図 2)。これによりMOLDA QuLiSは計算化学プログラムのインターフェース機能と本格的なタンパク質グラフィックス機能をあわせもつSBDDを指向した分子モデリングプログラムになったといえる。

【謝辞】本プログラムの開発は, 平成15年度科学技術振興調整費新興分野人材養成「サノテク・バイオ・IT融合教育プログラム」の一環として行った。

【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 2003 春季年会, 2012, 2003 年.

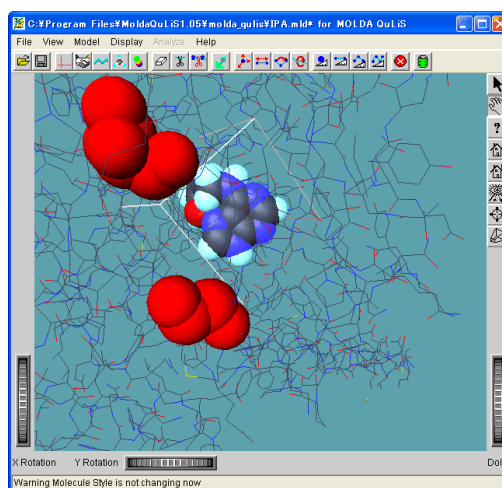


図 1. タンパク質中の基質と相互作用するアミノ酸の表示形式を変えることにより基質とのドッキング操作を容易にする

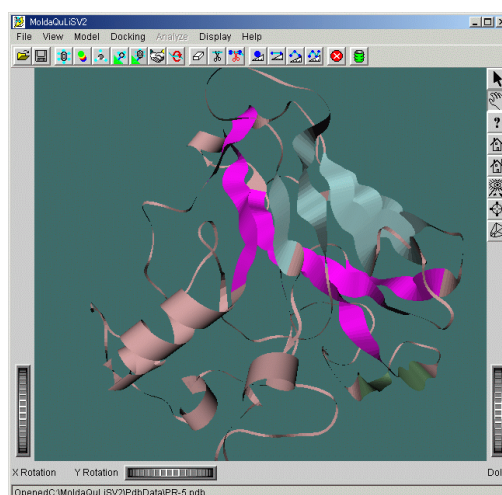


図 2. タンパク質を MOLDA QuLiS によりリボン表示したもの