

分子 Web 教材集の Chime 版から Jmol 版への移植

本間善夫¹

¹ 県立新潟女子短期大学(〒950-8680 新潟県新潟市海老ヶ瀬 471)

1. はじめに

本研究室ではこれまでに、Webブラウザと分子表示プラグインのChime(MDL社)¹⁾を利用して、ChimeおよびRasmolスクリプト記述によりボタンを押すだけで様々な分子や生体分子の表示様式を変えながら参照できる教材集を多数作成して公開してきた²⁾。Chimeが動作する環境はWindows上のInternet Explorer(以下IE)が標準であったが、2006年4月にリリースされたIEの修正パッチにより、embedタグを多用している一部のコンテンツはHTMLソースの大幅な書き直しが迫られた。そのような状況の中、Javaアプレットで動作するJmol³⁾が多くのサイトで利用されるようになってきていることを踏まえ、多くの機種で閲覧可能な同ビューアを利用したページに書き換えることにして、現在までに主要なコンテンツの移植作業が終了⁴⁾したので報告する。

2. Chime 版コンテンツの Jmol 版への移植

Chimeには静電ポテンシャル、親油ポテンシャル表示など優れた機能が多数あるがソフトウェアのダウンロードとインストールが必要な上に上記のように利用環境が限定される。それに比してJmolはJavaベースであるため多くのOS上でほとんど抵抗感なく分子を表示させることができる。JmolスクリプトはChime・Rasmolスクリプトは類似した部分も多く、これまで蓄積してきたタンパク質分子の amino 酸残基の疎水性インデックス値順色分けなど多様な表示様式をほぼそのまま移植することができた。また、新しくコンホメーション(α ヘリックス・ β ストランド)選択性⁵⁾表示機能も追加して、生体分子の学習教材としてさらに充実させた。図1に β バレル型膜タンパク質データ集⁶⁾の表示画面例を示す。

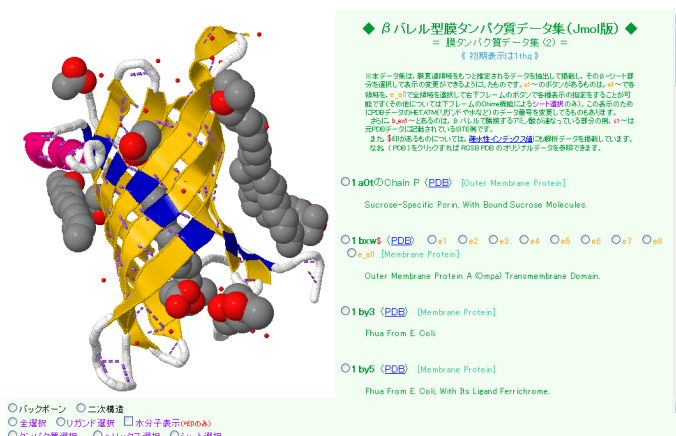


図1 β バレル型膜タンパク質データ集⁶⁾のPDBデータ1THQの表示例(濃色はHis22を基点にしたバレルの繋がり例, 点線は水素結合). Jmol版での表示変更はラジオボタン, チェックボックスによる。

参考文献・Web ページ

- 1) MDL, <http://www.mdli.com/jp/index.jsp>.
- 2) たとえば, 広瀬加奈子, 本間善夫, 日本コンピュータ化学会 2005 秋季年会講演要旨集, pp.40-41.
- 3) Jmol, <http://jmol.sourceforge.net/>.
- 4) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/jmol/pdb_1f88A.html.
- 5) G.A. ペツコほか著, 横山茂之 監訳, 「カラー図説 タンパク質の構造と機能」, p.18, メディカル・サイエンス・インターナショナル(2005).
- 6) 本間善夫, http://www.ecosci.jp/pdb/tmp_b1j.html.