

# Modrast-P with GTK+の開発

佐々 和洋<sup>a\*</sup>, 村田 一紀<sup>a</sup>, 宇野 健<sup>b</sup>, 林 治尚<sup>c</sup>, 中野 英彦<sup>a</sup>

<sup>a</sup> 兵庫県立大学大学院工学研究科, 〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167

<sup>b</sup> 広島県立大学経営学部経営情報学科, 〒727-0023 広島県庄原市七塚町 562

<sup>c</sup> 兵庫県立大学学術総合情報センター, 〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167

## 要旨

近年, 生体高分子や酵素の機能, フラワーレン関連物質やレセプターとリガンドの状態など様々な分野において, 分子間の包摂関係が着目されており, その状態を可視化する分子構造表示プログラムが開発されている. 分子構造表示プログラムの例としては, RasMol[1], Chime[2], Protein Explorer[3], DS Viewer[4], Mage[5] Swiss-PdbViewer[6], Cn3D[7]などがあげられる. RasMolは, 生体高分子の表示に適しており, 表示速度も高速なプログラムで, 幅広く利用されているフリーソフトである. ChimeはRasMolをweb上でのプラグインとしての機能を特化したものであり, Protein Explorerは, Chimeをさらに拡張子のGUI機能の強化や, アニメーション機能などの追加が行われている. DS Viewerは, Accelrys社により販売されているプログラムで, 分子表示だけでなく, 各原子の情報や化学式などが同時に確認できる特徴を有している. Mageは, 独自のKinフォーマットに採用しており, 動画などの視覚効果を備えている. Swiss-PdbViewerは, PDBの描画だけでなく, 原子間の角度と距離, スレッディング (threading), エネルギー最小化を計算も行える. Cn3Dは, 分子構造データベースであるEntrez[8]などからの三次元構造のデータを表示できる. また, 構造と配列アライメントを同時に表示し, NMR解析で得られた複数の画像を重ね合わせて表示できる特徴を持つ.

我々の研究室でも分子構造表示プログラムModrast-P [9-11]の開発を進めてきた. Modrast-Pにおける特徴は, 数種類の分子表示形態を持ち, 分子を切断して表示するClipping機能, PDBファイルのデータベース検索システムを有している点である. 特に, 切断面の表示や部分切断が可能な本プログラムにおけるClipping機能は, たんぱく質などの生体高分子だけでなく低分子においても, 通常の表示では確認が困難な分子内部の状況を表示する機能であり, これはその周辺部位を含めた状態を確認する上において有効である. このような機能は, 前述したような多くの分子構造表示プログラムにはあまり例を見ない特徴であり, 生体機能性分子における生理活性の解明に有用であると考えられる. しかし, 既発表のModrast-PはSun MicrosystemsのSPARCシリーズ上でのみ実行可能であった. そこで, プラットフォームに依存せず, 種々のUNIX系のコンピュータで利用することとGUI (graphical user interface) 化を目的として, X Window Systemのツールキットの一つであるGTK+[12]を用い"Modrast-P with GTK+"の開発を行った.

また, 機能においては, 代表的な生体高分子シミュレーションソフトであるAMBER[13]との高い親和性の実現を目指し, シミュレーションの実行支援機能[14]の実装を行ってきたが, 今回さらに, シミュレーション結果に対するアニメーション機能および数値データ解析機能を追加した. これら機能により, 視覚的および数値的の両面から研究対象分子の構造や挙動を確認することが可能となった.

[1] <http://openrasmol.org/>

[2] <http://www.umass.edu/microbio/chime/>

[3] <http://www.umass.edu/microbio/chime/pe/protexpl/frntdoor.htm>

[4] <http://www.accelrys.com/>

[5] Word, J. M., Lovell, S. C., LaBean, T. H., Taylor, H. C., Zalis, M. E., Presley, B. K., Richardson, J. S. and Richardson, D. C., *J Mol Biol.*, 285, 4, 1711-33 (1999). <http://kinemage.biochem.duke.edu/index.php>

[6] Guex, N., *Experientia*, 52, A26 (1996). <http://kr.expasy.org/spdbv/>

[7] Hogue CWV, Ohkawa H, Bryant SH. and *Trends Biochem. Sci.*, 21, 226-229, (1996).

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/CN3D/cn3d.shtml>

[8] <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Entrez/>

[9] 宇野健, 張金碯, 澤野太郎, 山名一成, 中野英彦, *J. Chem. Software*, 2, 4, 212-218 (1995).

[10] 宇野健, 松久茂, 林治尚, 山名一成, 中野英彦, *J. Chem. Software*, 3, 2 (1996).

[11] 宇野健, 河島康之, 張金碯, 林治尚, 山名一成, 中野英彦, *J. Chem. Software*, 4, 1, 1-10 (1997).

[12] <http://www.gtk.org/>

[13] Weiner, S. J., Kollman, P. A., Nguyen, D. T. and Case, D. A., *J. Comput. Chem.*, 7, 230 (1986).