

# Windows の下で動作する切断機能を持つ分子構造表示プログラムの開発

家馬陽介<sup>1</sup>、 佐々和洋<sup>1</sup>、 林 治尚<sup>2</sup>、 中野英彦<sup>1</sup>

<sup>1</sup>兵庫県立大学院工、<sup>2</sup>同大学学術総合情報セ (〒671-2280 姫路市書写 2167)

【緒言】我々が開発した分子構造表示プログラム“Modrast-E with GTK+” [1]は、同種のプログラムが通常持っている空間充填模型、球棒模型などの各種の表示形態に加えて、分子の切断図表示という特徴ある機能を有しており、GTK+をインストールしているUNIX系のOSのもとでは、プラットフォームに依存せずに実行が可能となっている。しかし、広く普及しているWindowsの下で実行するためには、GTK+をインストールする必要があり、あまり一般的ではない。そこで、特別なシステムをインストールすることなくWindowsの下で動作可能なプログラムの開発を行った。

【開発言語】開発言語にはActiveBasic [2]を用いた。ActiveBasicは山本によって開発されたBasic言語であり、その特徴として、(1)フリーウェアである、(2)Win32APIに完全に対応している、(3)ランタイムライブラリを必要としないネイティブコードを生成する、などが挙げられる。(1)については、コンパイラを含む開発環境を無料で作者が運用する公式サイト[3]からダウンロードできるだけでなく、作成したプログラムを自由に配布できることが明記されている。用いたバージョンはVer.4.24.00である。

【結果】現時点で、既発表[1]のModrast-P with GTK+の持つ機能のうちで、タンパク質、核酸などの生体高分子のPDBデータフォーマットに対応した表示機能および分子動力学計算プログラムのAmber実行支援機能を除いた、基本的な分子構造表示機能および切断分子表示機能の大部分の実装を完了した。さらに、切断機能においては、Modrast-P with GTK+では切断平面の定義の際の3点(3原子)の指定においてキーボードから原子の番号を入力する筆意用があったのを、画面に表示された分子中の原子をマウスで指定するようにするなどの、操作性の改良を行なった。

図1に示したのは、トルエンを包摂したカリックス[4]アレーンの空間充填表示である。図2は、図1に示した包摂体を、トルエンの芳香環の平面で切断した図である。

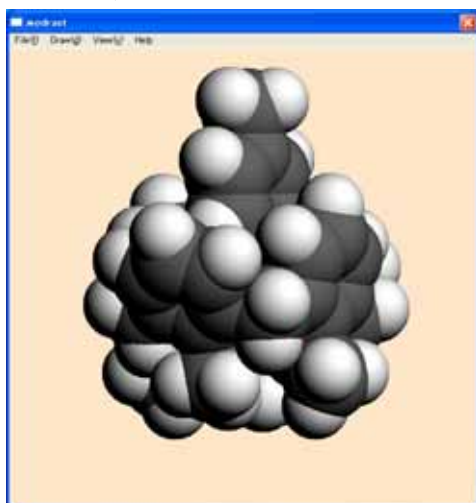


図1

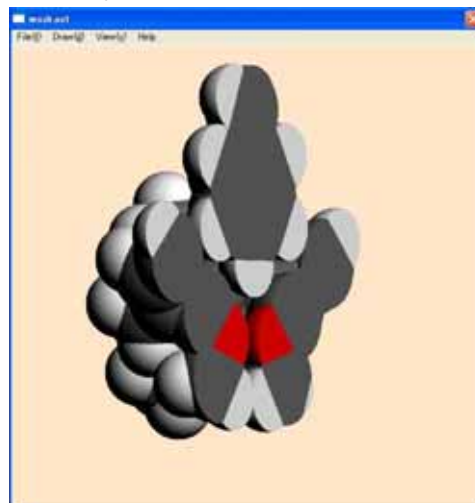


図2

## 参考文献

- [1] 佐々和洋、村田一紀、宇野 健、林 治尚、中野英彦、Modrast-P with GTP+の開発、*J. Comp. Chem. Jpn.*, **4**, 119 (2005)
- [2] 山本大祐、ActiveBasic オフィシャルユーザーズガイド、毎日コミュニケーションズ (2004)
- [3] <http://www.activebasic.com>