

タンパク質構造とダイナミックスの可視化

○庄司光男、山口兆

大阪大学大学院理学研究科(〒560-0043 大阪府豊中市待兼山町 1-1)

mshoji@chem.sci.osaka-u.ac.jp

これまで分子構造 3D 表示プログラム (Makiko) を独自に開発してきた [1, 2]。Makiko は分子情報を可視化するためのライブラリーであり、Java 言語で書かれている。そのため、開発や拡張、移植性に優れている。既に分子構造、分子軌道、スピン状態などを綺麗に 3D 表示可能となっている。今後は公開に向けた準備を行っていく。また携帯電話版 iMakiko についても開発を行い [2]、iMakiko については現在公開している (Fig. 1)。

近年の量子化学計算の発展により、タンパク質全体の第一原理的計算も可能になってきている。そのため分子構造を表示するだけでなく、タンパク質のヘリックス構造や DNA ラセン構造など、より高次情報を可視化する必要がある。また、第三者に分かりやすく表示させる為には、粗視化の表現方法についても改善の余地があると考えられる。

タンパク質表示の為の可視化プログラムは多く存在するが、化学結合を結べなかったり、分子軌道を表示できなかったりと、依然として生物科学向けのプログラムが多い。

そのため本研究では化学的に満足できるタンパク質や巨大分子の可視化について研究を行った。また、分子運動を表示できるようにプログラムの拡張を行った。

当日は Makiko を用いたタンパク質の可視化についてのデモを行う予定である。



[特徴] iMakiko は携帯電話で分子構造を表示できる唯一の i アプリです。

[動作環境] NTT DoCoMo 携帯 (FOMA:901 以降)

[ダウンロード] 右の QR コードからフリーでダウンロードできます。

[サポート] 動作環境や要望に関しては庄司までご連絡ください。

Figure. 1 iMakiko の QR コード。QR コードは携帯電話 (DoCoMo) のバーコードリーダーを使って読み込めます。

【参考文献】

[1] 庄司光男, 山口兆, SCCJ 春年会 2005.

[2] 庄司光男, 山口兆, SCCJ 春年会 2006.