

## Gromacs のための計算支援ソフト GISP の開発

○森 一樹<sup>1,3</sup>, 樺島 智大<sup>2</sup>, 源 聡<sup>2</sup>, 玉城 哲平<sup>1,3</sup>, 上田 一義<sup>1</sup><sup>1</sup> 横浜国立大学工学研究院(〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-5)<sup>2</sup> 伊藤忠テクノソリューションズ株式会社 (〒100-6080 東京都千代田区霞が関 3-2-5)<sup>3</sup> アドバンスソフト株式会社(〒107-0052 東京都港区赤坂 1-9-20)

## [緒言]

今回我々は、分子動力学計算 (MD 計算) 及び計算化学を大学の授業等で簡単に使えるようにすることを目的に、分子動力学ソフトで且つフリーソフトで有名な Gromacs [1] のためのグラフィカルユーザーインターフェイス (GUI) [2] を開発した。これまで Gromacs を使うには、コマンドラインでの入力を行わなくてはならず、さらに英語のマニュアルを読まなければならないなど、初めて分子動力学に触れる人にはかなり知識と経験を必要とした。この苦労を低減するために、誰にでも簡単に扱えるようなインターフェイスがあればと我々は常々考えていた。そこでこのようなインターフェイスを作成することに至った。

## [説明]

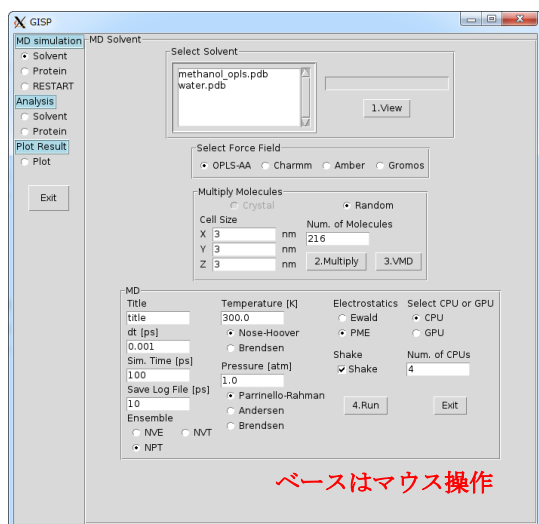


Fig.1 溶媒計算の画面

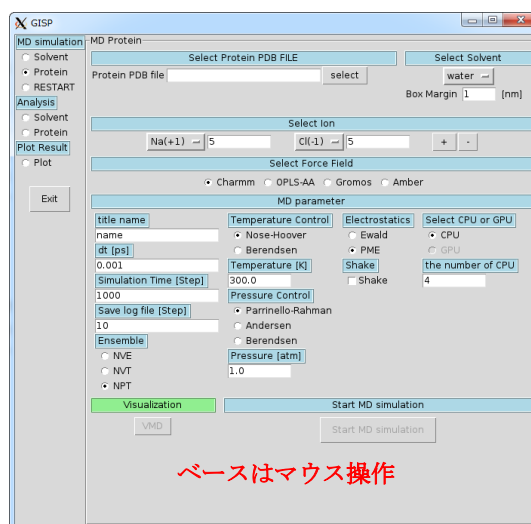


Fig.2 タンパク質計算の画面

現在のバージョンでは、溶媒の計算・たんぱく質の計算を簡単に行える。ユーザーは計算を行いたい分子構造ファイルである PDB ファイルを用意するだけで、コマンドラインでの操作がなく、ボタン操作だけで行える仕様である。Gromacs でそのまま実行できるように、たんぱく質以外の物質の除去や、極性アミノ酸の荷電状態、末端などを適切に修正する機能を組み込んでいる。そのためユーザーは Protein Data Bank Japan などからたんぱく質の PDB ファイルをダウンロードしてくるだけで、そのまま MD 計算に利用できる。ダウンロードは <http://www.sk&soft.com/download/> でダウンロードすることができる。横浜国立大学上田研究室のホームページ (<http://www.ueda-lab.ynu.ac.jp/software.html>) からもダウンロードページにアクセスすることができる。

## [参考文献]

[1] Gromacs, <http://www.gromacs.org/>[2] K. Mori, T. Kabashima, S. Minamoto, T. Tamaki and K. Ueda, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **11**, 98, (2012).