

分類 非経験的分子軌道法プログラム、分子モデリング、データベース
 キーワード *ab initio* FMO 法、タンパク質、3D 分子構造表示、データベース、リガンド、結合実験
 開発者 中野達也、原田隆範、阿部行伸、山口貴吏 (ABINIT-MP)/加藤昭史 (BioStation Viewer),
 中田琴子、岩澤義郎、愛澤昌宏、甘利真司、小野寺賢司、張 軍衛 (KiBank)
 改訂版公開年月 2003年12月 (ABINIT-MP, BioStation Viewer)
 公開年月 2003年10月 (KiBank)
 コード名 ABINIT-MP、BioStation Viewer, KiBank
 使用言語 Fortran90, MPI (ABINIT-MP)/Java, Java3D (BioStation Viewer)
 PostgreSQL, Jakarta Tomcat, Java, JavaScript (KiBank)

● ABINIT-MP, BioStation Viewer 及び KiBank

非経験的フラグメント分子軌道 (*ab initio* Fragment Molecular Orbital) 法を用いた分子間相互作用解析プログラム ABINIT-MP のソースコード、技術資料、計算用サンプルデータを公開する。可視化プログラム BioStation Viewer については、実行モジュールと利用マニュアルを公開する。また、医薬品などの開発の標的となるタンパク質や低分子化合物のデータを収集した標的データベース KiBank を、自由に検索することができるように、インターネット上で公開する。これらは文部科学省 IT プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの成果物として公開するものです。

コード配布元およびデータベース URL

<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/result/software/> (ABINIT-MP および BioStation Viewer)

<http://kibank.iis.u-tokyo.ac.jp/> (KiBank)

● ABINIT-MP 及び BioStation Viewer の概要

ABINIT-MP は、*ab initio* FMO 法 [1] に基づいて、タンパク質、DNA、リガンド分子の複合体の相互作用解析を、残基単位で実行できるプログラムであり、高精度な計算を高速に実行できる。また、パソコンから PC クラスタや並列スーパーコンピュータまでの幅広い計算環境に対応しているため、分子のサイズに合わせて計算機を選択できる。

BioStation Viewer は、ABINIT-MP の計算結果の解析および可視化を行うプログラムである。Java および Java3D で開発しているため、幅広いハードウェア上で使用できる。分子のモデル表示、計算結果の表

示（等電子密度面、静電ポテンシャル、電場、分子軌道など）の機能を備えている。

計算例

ABINIT-MPを用いた解析例を示す。図1は、SARSウイルスプロテアーゼ（構造データ提供：北里大学薬学部梅山秀明教授）と抗ウイルス剤の候補となる分子の相互作用を ABINIT-MP を用いて計算し、BioStation Viewer でその計算結果を図示したものである [2]。候補分子（CPK 表示）の周辺残基（スティック表示）を、リガンド結合により不安定化しているものと安定化しているもので色分けした。図2は、ABINIT-MP でアデニン分子が作る電場を計算し、BioStation Viewer で電気力線として可視化したものである。

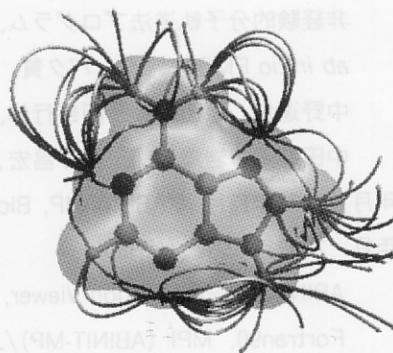
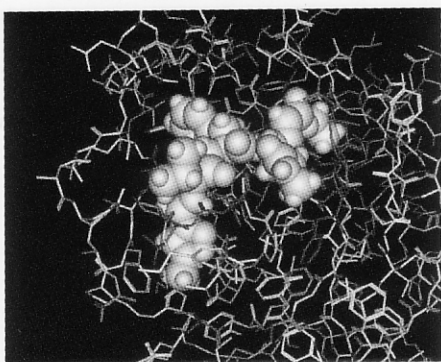


図1. BioStation Viewer による相互作用エネルギーの可視化（青～赤のグラデーションで表示）

図2. BioStation Viewer による分子周囲の電場の電気力線表示

●KiBank の概要

医薬品開発の標的となるタンパク質と低分子化合物の基礎データおよびこれらの結合実験データを収集したデータベースである（図3）[3]。2003年10月1日現在で核内受容体30タンパク質、低分子化合物4718物質、結合実験データ2319件が登録されている。右図は検索結果画面で相互に関連するデータを参照できる。また、このデータベースは ABINIT-MP へ分子の3次元構造データを供給する。

Chemical	EW Value	Chemical Name	Aggr. Weight	Site	Therm. Model	Therm. Model	Index	Ref ID
Androgen Receptor	1.0000	Androgen Receptor	288.36	Androgen Receptor	Androgen Receptor	Androgen Receptor	1	1
Androgen Receptor	1.0000	Androgen Receptor	288.36	Androgen Receptor	Androgen Receptor	Androgen Receptor	1	1
Androgen Receptor	1.0000	Androgen Receptor	288.36	Androgen Receptor	Androgen Receptor	Androgen Receptor	1	1
Androgen Receptor	1.0000	Androgen Receptor	288.36	Androgen Receptor	Androgen Receptor	Androgen Receptor	1	1
Androgen Receptor	1.0000	Androgen Receptor	288.36	Androgen Receptor	Androgen Receptor	Androgen Receptor	1	1

図3. KiBank による検索例

参考文献

[1] T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, K. Fukuzawa, Y. Akiyama, M. Uebayasi and K. Kitaura; Chem. Phys. Lett., **351**, 475 (2002).

[2] 甘利真司、竹田一志、鷹真由子、岩館満雄、山本典生、藤井信孝、山本直樹、梅山秀明、中野達也; "SARS ウイルスプロテアーゼと阻害剤のフラグメント分子軌道法による相互作用解析", 第4回 CBI 学会大会 (2003)

[3] Junwei Zhang, Masahiro Aizawa, Kenji Onodera, Shinji Amari, Yoshio Iwasawa and Kotoko Nakata; "Ki Bank: A Database for Molecular Interaction Analysis between Proteins and Chemicals", 第4回 CBI 学会大会 (2003年).