



分類	非経験的分子軌道法プログラム、ドッキング・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、XUFF、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、望月祐志、田中 皓、小林将人、長谷川浩司、小川哲司 (ABINIT-MP) 愛澤昌宏、張 軍衛、甘利真司、岩澤義郎、中田琴子 (K/Bank) 加藤昭史、福澤 薫、佐藤智之 (BioStation Viewer) 谷森奏一郎、雨宮克樹 (BioStation Launcher)
作成年月	2007 年 12 月
コード名	ABINIT-MP, K/Bank, BioStation Viewer, BioStation Launcher
使用言語	Fortran90, MPI (ABINIT-MP) PostgreSQL, Jakarta Tomcat, Java, JavaScript (K/Bank) Java, Java3D (BioStation Viewer, BioStation Launcher)

タンパク質-化学物質相互作用解析システム BioStation

タンパク質-化学物質相互作用解析システム BioStation は、タンパク質と化学物質との相互作用を量子化学計算に基づいて解析し、効率的な化合物探索や分子設計を可能にすることを目標に開発を行っているシステムである。非経験的フラグメント分子軌道 (*ab initio* Fragment Molecular Orbital) 法を実装した ABINIT-MP[1]、その計算結果を可視化し解析する BioStation Viewer (以下 Viewer)[1]を中心に、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データベース K/Bank、これらを統合する BioStation Launcher (以下 Launcher) から構成される。最新版の ABINIT-MP、BioStation Viewer と Launcher についてソースコード、技術資料、計算用サンプルデータを公開する。K/Bank については、利用者が自由に検索することができるように web データベースとして公開している。このソフトウェアベースでは、2007 年度に行われた開発を中心に紹介する。

コード配布元及び K/Bank の URL

<http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/result/download/index.php>
<http://kibank.iis.u-tokyo.ac.jp/>

ソフトウェアの概要

○ *Ab initio* FMO 法に基づいた分子間相互作用解析プログラム ABINIT-MP

ABINIT-MP は *ab initio* FMO 法に基づいて、タンパク質、DNA、低分子化合物及びそれらの複合体の相互作用をフラグメント単位で解析するプログラムであり、数百残基のタンパク質の電子状態計算が、比較的小規模（数十コア）の PC クラスタで可能となっている。また、高度にベクトル化されているため、地球シミュレータ 512 ノード（4,096 プロセッサ）を用いると、エストロゲン受容体リガンド結合部位（241 残基）の FMO-MP2/6-31G 計算が 9.5 分で計算できる。

また、小川らによって新たに開発された生体分子計算用の分子力場 XUFF (eXtended Universal Force Field) を ABINIT-MP に搭載した。XUFF は、UFF 力場を基礎としているが、静電相互作用項に MQEq (Modified Charge Equilibration) 法を用いることを特徴としている。MQEq 法により、電荷を固定する通常の分子力場には含まれない電荷移動や分極の効果を取り入れることが可能となり、静電相互作用が重要となる分子間相互作用の計算精度向上が期待される。タンパク質-リガンド複合体など XUFF 力場により構造最適化することが可能になった。

更に、生体分子のうちファーマコフォアなど重要部分を FMO 法で、それ以外の部分を XUFF 力場で計算する QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics) 計算機能を開発し、ABINIT-MP へ実装した。これにより、通常の FMO 法計算の 1/5~1/10 程度の計算時間で、タンパク質-リガンド間相互作用エネルギーを 5% 程度の誤差（通常の FMO 法計算との比較）で計算することが可能になった（図 1 参照）。

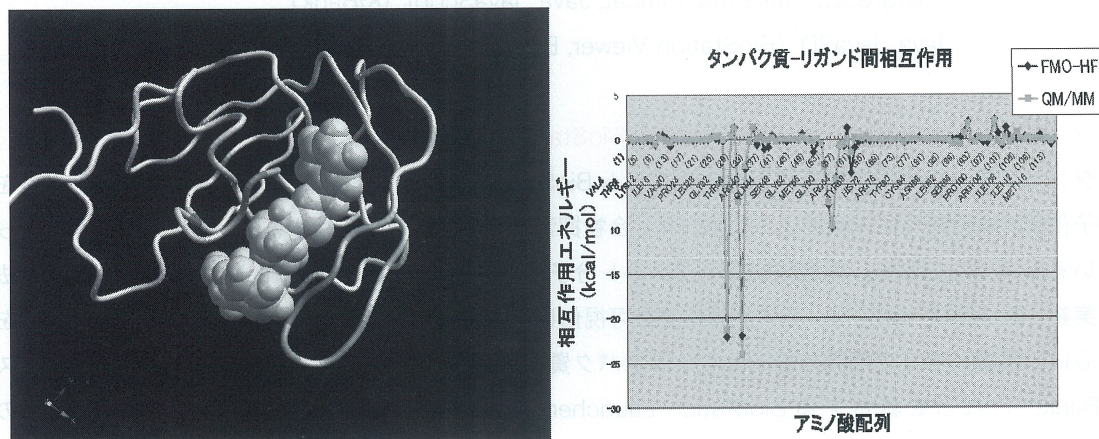


図 1 ネコ免疫不全ウィルスプロテアーゼとリガンド複合体 (PDBID: 1B11) の QM/MM 計算によるフラグメント間相互作用可視化 (左図)。リガンド分子を QM 領域としその外側に MM 領域と Buffer 領域を設定した。QM/MM 計算と FMO-HF 計算によるリガンド・プロテアーゼ間相互作用の比較 (右図)。

参考文献

- [1] 中野達也、望月祐志、甘利真司、小林将人、福澤 薫、田中成典、*J. Comput. Chem. Jpn.* **6**, 173-184 (2007). ; 福澤 薫、中野達也、加藤昭史、望月祐志、田中成典、*J. Comput. Chem. Jpn.* **6**, 185-198 (2007).