



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
キーワード	ab initio FMO 法、XUFF、タンパク質、3D 分子構造表示、リガンド、結合実験
開発者	中野達也、望月祐志、沖山佳生、日野 理、小林将人、長谷川浩司、小川哲司、 山下勝美、守田伸明 (ABINIT-MP) 加藤昭史、佐藤智之、福澤 薫 (BioStation Viewer)
作成年月	2010年3月
コード名	ABINIT-MP、BioStation Viewer
使用言語	Fortran90、MPI (ABINIT-MP) Java、Java3D (BioStation Viewer)

### バイオ分子相互作用シミュレータ BioStation

バイオ相互作用シミュレータ 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ミュレータである。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[1-3]、その計算結果を可視化し解析する BioStation Viewer[1、2] から構成されるシミュレータツールである。本リーフレットでは、2009 年度に行われた開発を中心に紹介する。

なお、2010 年 6 月に最新版の ABINIT-MP ver.4.3 及び BioStation Viewer ver.12.0 の公開を行う。ABINIT-MP に関してはソースコード、実行プログラム、技術資料、計算用サンプルデータを、BioStation Viewer に関しては実行プログラム、技術資料、可視化用サンプルデータをダウンロード可能な形で提供する。

ソフトウェア配布元 URL

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/dl/index.php>

## 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（ES2）の 64 ノード（512 プロセッサ）を用いると、インフルエンザウイルス HA タンパク質単量体-抗体複合体（921 残基）の FMO-MP2/6-31G 計算が 2 時間で計算できる。

2009 年度には以下の 2 項目について改良、開発を行った。

## 1) 密度汎関数法（Density Functional Theory ; DFT)

FMO-DFT 安定性の改善を行った。現在のところ、利用できる汎関数は、SLATER、BECKE88、SVWN、SVWNRpa、BVWN、BVWNRpa、SLYP、BLYP、B3LYP、X3LYP、BHandH、BHandHLYP である。

## 2) QM/MM 法

QM-MM 領域間に共有結合（Bond Detached Atom ; BDA）が無い場合の、FMO-HF/XUFF 構造最適化計算が可能である。

2010 年度中に ABINIT-MP 開発版の機能全体の整備を行い、2011 年度に公開する予定である。

## ○ フラグメント分子軌道法可視化・解析・編集ツール BioStation Viewer

BioStationViewer は、ABINIT-MP での計算用入力ファイルの作成、計算結果の可視化・解析を行うプリ・ポストプロセッサである。基本的な分子構造表示機能のほかに、電子密度、静電ポテンシャル、分子軌道の等値面表示、モニタリング機能、分子重ね合わせの機能、IFIE 解析、CAFI 解析、FILM 解析、VISCANA 解析など FMO 計算独自の結果の解析機能を備えている。

2009 年度は、以下の 3 項目について改良、開発を行った。これらの開発により、ABINIT-MP の計算結果の解析能力、初期構造作成能力が向上した。

## 1) QM/MM のための入力指定機能

## 2) DNA、RNA の編集機能

## 3) フラグメント分割機能のユーザビリティの向上

## 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).
- [2] 佐藤、中野、望月編「プログラムで実践する生体分子量子化学計算」森北出版 2008
- [3] "The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems" edited by D.G. Fedorov and K. Kitaura (Taylor & Francis/CRC Press, Boca Raton, FL, 2009). (執筆責任者：福澤 薫)