

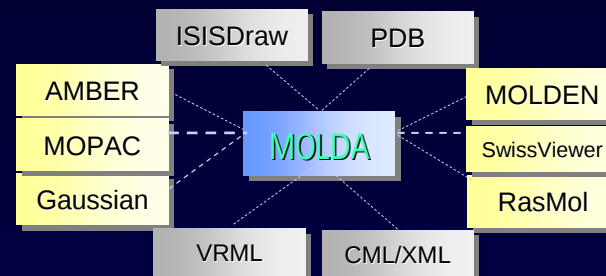
第一原理に基づいた分子言語による生命プログラミング

開発者 : 広島大学大学院 理学研究科 吉田 弘 yoshida@molda.org
: 日清食品(株) 食品安全研究所 杉野圭司 k-sugino@mx.biwa.ne.jp

1. テーマ

生命システムは、ゲノムによりプログラミングされ、ゲノムのプログラムは、核酸塩基という分子言語により記述されます。ある塩基配列を持つゲノムが、どのような構造のタンパク質を合成し、どのような機能を発現するかをシミュレートする、使い易い、現場向きのソフトウェアの開発が望まれています。

本プロジェクトでは、量子物理学の第一原理に基づいた計算化学的手法をバイオインフォマティクス分野に応用し、理論計算に基づくタンパク質の設計データを3次元高速表示する、直感的な設計用ポストゲノム対応型の分子モデリング支援ソフトを開発しました。



ソフト連携

MOLDA OuLiS (Quantum Life Sciences)

<http://www.molda.org>

2. 特色

(1) 機能

ホリ・パ・フド等の直感的分子モデリング (3D)
配列シーケンスビュー (部分On/Off表示、モデル表示切替)
ポイント・ミュテーション、コンホメーション
モレキュラー・ドッキング、Structure-based Drug Design (SBDD)

(2) 連携

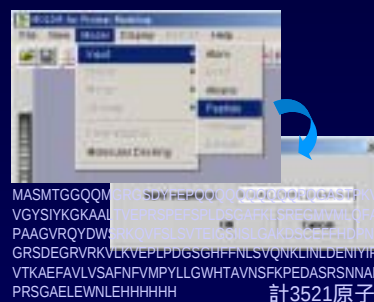
AMBER、MOPAC、GAMESS、Gaussian等 ; 計算化学
CML/XML、VRML、ISISDraw、PDB等 ; モデル情報
MOLDAデータ、表示データのOpen化 ; 拡張

(3) 操作

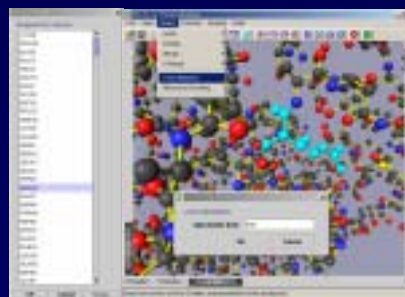
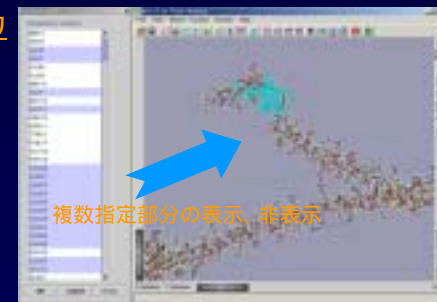
フル3D操作
多彩なグラフィックス (空間充填・球棒・Dreidingモデル)
10,000原子 ; PC上で高速容易な取扱い

(4) 構成

言語は Java
3Dは シンク・ラフのOpenInventor/Java
配布は ASP形式でInternet配布

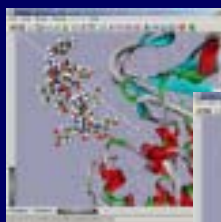


シーケンスビュー



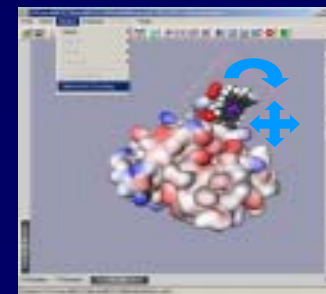
ポイント・ミュテーション

残基ARG46はHISに変更されました。



モレキュラー・ドッキング
視覚的・直感的ドッキング

VRMLのホスト分子に
MOLDAのゲスト分子を
ドッキングしている例



連絡先: 量子生命科学プロジェクト研究センター 吉田 弘
〒739-8526 広島市鏡山一丁目3-1 広島大学大学院理学研究科内
<http://www.qulis.org/>