

タンパク質構造データベースから分子構造を 仮想空間で可視化する技術の開発

○増田 恵¹, 井上 哲理², 上平 員丈², 棚橋 航³, 小池 あゆみ^{1,4}

(¹神奈川工科大・バイオメディカル研究センター, ²神奈川工科大・情報, ³(株)フィアラックス, ⁴神奈川工科大・応用バイオ)

概要

タンパク質分子の立体構造を解析し、作用機構を解明することは、現在のバイオサイエンス研究では基本的で重要なテーマとなっており、疾病に関わるタンパク質の構造情報をもとに薬を設計する創薬戦略は、新しい研究基盤技術として期待されている。これまでは、**Protein Data Bank (PDB)**に登録されている三次元構造データを 3DCG (三次元コンピュータ・グラフィックス) でパソコン画面に表示し、構造情報を得ることが主流である。しかし、タンパク質分子が膨大な数の原子から構成されていることから、CG モデルの表示が複雑なものになり、分子全体の大まかな形を観ることはできるが、**分子内部の細部構造**を理解するには熟練を要する。今回我々は、高性能 HMD (ヘッドマウントディスプレイ) を用いて、PDB データを**ライフサイズ (人間サイズ) の仮想空間**で表示するソフトウェアを開発した。標的分子の設計を直感的に行うことができるシステムは、タンパク質分子の三次元構造や構造変化の理解を向上させ、**分子設計を容易**にするためのデータベース情報の新しい**可視化技術**として期待できる。

PDBデータ



X線結晶解析法、NMR法などによって実験的に決定された、タンパク質と核酸の3次元構造の構造座標(立体配座)を蓄積している国際的な**タンパク質構造データのデータベース**



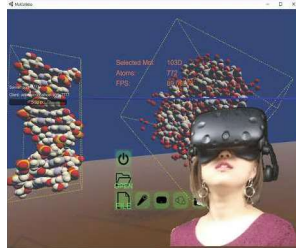
CGツール



タンパク質分子は、PC上では、表示が複雑になり、全体や拡大して内部を観ることはできるが、詳細に**視覚化**できない。科学的な想像力を要する**研究の制約**になっている。

タンパク質分子を仮想空間で表示

データ変換
空間表示プログラム

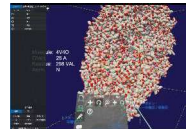


開発ソフトウェアとユーザー

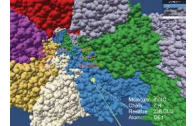
デモの評価

	良好	改善
有効性	<ul style="list-style-type: none"> 凹凸の様子を見て取れる 綺麗で、分かりやすい 突出や空洞を体感できる 	<ul style="list-style-type: none"> 複数人での共有 分子の動く速度の変化 分子同士の結合を見たい
効率性	<ul style="list-style-type: none"> 直感的な操作性 コントローラー使用感 	<ul style="list-style-type: none"> 位置情報の保持 装置の無線化 音声機能
満足度	<ul style="list-style-type: none"> 興奮するような映像(画質) 構造内を自由自在にできる 	<ul style="list-style-type: none"> VR酔い 操作の簡易化

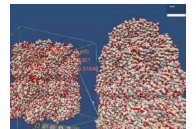
編集・表示機能



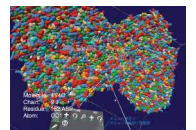
モデル移動・回転



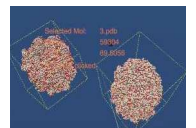
表示形状や色の変更



複数分子の表示



原子情報などの表示



アニメーション

共有・簡易型・直感的機能

共有機能



複数人で同時に同じ構造を別々の視点での観察



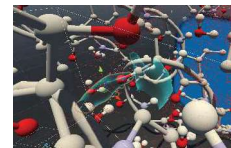
応用化学・バイオサイエンス専攻の学生が体験している様子

簡易型HMD



スマートフォンアプリを使用、コードレスの簡易式ソフトウェア

直感的インターフェイス



手で触れているような**ハンドモデル**

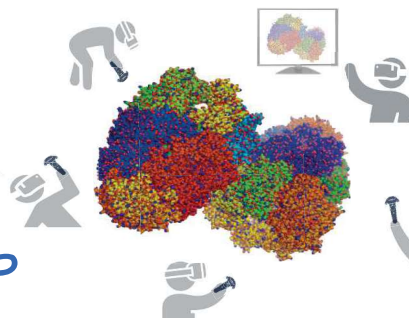
皆で共有でき、直感的な分子設計を行えるツールへ

簡易型HMD

複数人で同視点で共有



教育現場や
ディスカッションで役立つ



直感的インターフェイス

複数分子の扱い



ドッキングシミュレーション
リガンドとの結合を体感

