

## 分子ビューア Jmol を利用した DVD-ROM 版分子事典

○本間善夫<sup>1</sup>、星 鉄矢<sup>2</sup>、川端 潤<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 県立新潟女子短期大学(〒950-8680 新潟市海老ヶ瀬 471)

<sup>2</sup> ビーグル株式会社(〒160-0023 新宿区西新宿 8-8-3)

<sup>3</sup> 北海道大学大学院農学研究院(〒060-8589 札幌市北区北 9 条西 9 丁目)

### 1. はじめに

これまでブラウザの Internet Explorer(以下 IE)の仕様変更に対応して、Web 上に公開してきた Chime を用いた分子モデルデータ集を、Java アプレットで動作する Jmol<sup>1)</sup>を用いたコンテンツに移植作業を続けて主要なものはほぼ完了した<sup>2,3)</sup>。

しかし、1999 年に上梓した「パソコンで見る動く分子事典」<sup>4)</sup>の付録 CD-ROM に収録した分子データ集は Chime 版であるため、IE のバージョンアップと 2007 年 3 月の Windows Vista 登場などの影響で、利用できる環境が少なくなった状態のままであった。そこで、Jmol に対応した専用ビューアを開発して利用しやすくしてデータも追加し、書籍本文の新規記事との差し替えも一部行って出版することになった<sup>5)</sup>ので報告する。

### 2. DVD-ROM 版分子事典新版の概要

Web 上の Jmol コンテンツはブラウザを利用しているが、新 DVD-ROM 版では図 1 のような分子ビューアを Java によって開発した。データ名リスト(検索も可能)、分子モデル表示、分子表示変更の 3 つの window から成り、使い勝手を格段に向上させることができた。表示変更では、タンパク質では二次構造表示、酸性・中性・塩基性アミノ酸区別、糖鎖別着色などが可能であり、DNA・RNA では塩基別着色(ATGCU)ができるなど従前の方式を踏襲して、生体高分子の構造を学ぶ上で有用なツールとなっている。Protein Data Bank 登録のデータを一部加工したものなど約 1100、低分子・高分子で約 1900 の合わせて約 3000 データを収録し、充実したものになっている。Windows XP/Vista で動作確認を行った。

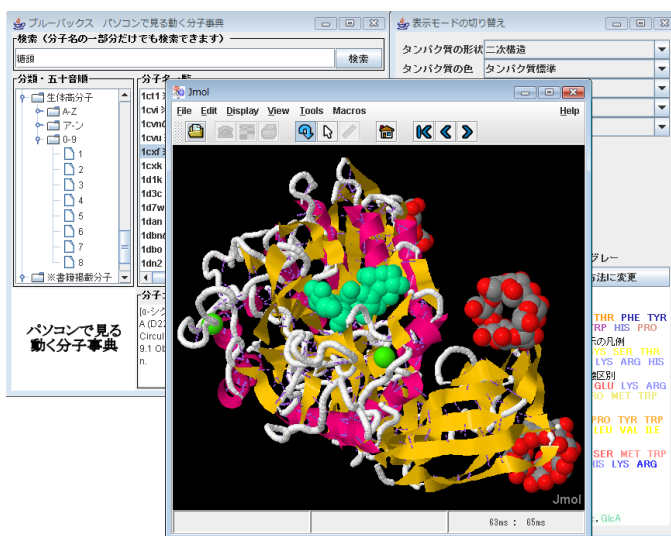


図 1 専用ビューアによる分子表示例(データは糖鎖や $\alpha$ -シクロデキストリンを含む PDB 1CXF)。左からリスト、モデル表示、表示変更の各 window。

謝辞 本 DVD-ROM 版データ集作成に当たっては、多くのプログラム開発担当会社との交渉などで講談社の松下友一さんに多大なご尽力をいただいたことを感謝申し上げます。

### 参考文献・Web ページ

- 1) Jmol, <http://jmol.sourceforge.net/>
- 2) 本間善夫, Jmol 版「分子の学習帳」, [http://www.ecosci.jp/jmol/pdb\\_1f88A.html](http://www.ecosci.jp/jmol/pdb_1f88A.html)
- 3) たとえば, 本間善夫, 第 29 回情報化学討論会講演要旨集, 講演番号 JP33
- 4) 本間善夫・川端潤, 「パソコンで見る動く分子事典」, 講談社(1999)
- 5) 本間善夫・川端潤, 「パソコンで見る動く分子事典 Windows Vista 対応版」, 講談社(編集中)