

ケモインフォマティクスへの 貢献～化学反応経路マッ プ解析ツール RMapView

小田 朋宏、土屋 正人
Tomohiro Oda, Masato Tsuchiya

◆「埋蔵分子」を求めて

ケモインフォマティクスは、コンピュータと情報化技術を用いて化学領域の問題に適用する方法論です。現在存在が確認されている化学物質は約 7000 万種類あり、年間数 10 万～100 万のオーダーで増え続けているそうです。しかしながら、理論的には存在し得るが確認されていない化学物質の数は膨大であり、これらの中から、医療やエネルギー、食料など、人類が抱えている問題解決につながる「埋蔵金」ならぬ「埋蔵分子」が発掘されることが期待されます。

大量の分子構造の中から、有益な分子構造を探し、その分子構造を得るための反応を見つけるのは大変な労力が必要ですが、化学反応経路自動探索プログラム GRRM(Global Reaction Route Mapping)が開発されたことにより、量子力学的に存在可能な分子構造を探索できるようになりました¹。

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 データ中心科学リサーチcommonsの「データ中心ケミストリ」研究プロジェクト²では、GRRM を用いた化学反応経路マップ解析ツール “RMapView” を開発、公開しています³。SRA 先端技術研究所 (SRA-KTL) は、RMapView の開発において、ユーザから見た有効な

探し方を提供するというインタラクティブ性の側面から関わっています。

◆RMapView

図 1 は RMapView の画面レイアウトです。左に反応マップビュー、右にエネルギーツリービュー、下に経路リストが配置され、エネルギーツリーにはエネルギーゲージがあります。

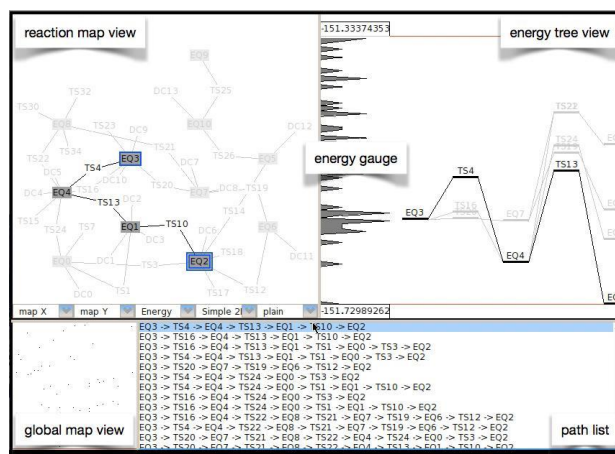


図 1 RMapView 画面レイアウト

RMapView を使った化学反応経路マップ解析を見ていきます。解析対象のデータをロードします。

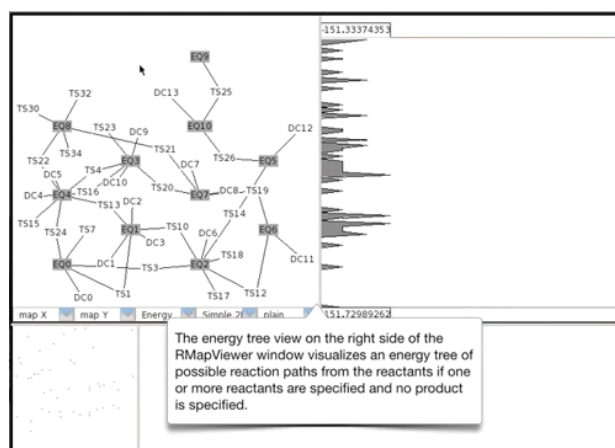


図 2 解析対象のデータをロード

¹ <http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM/index.html>

² <http://rc.rois.ac.jp/database/d04/index.html>

³ <http://sourceforge.net/projects/rmapviewer/>

反応マップビューで 1 つ以上の反応物質が指定される場合、エネルギーツリービューに反応物質から可能な反応経路のエネルギーツリーが示されます。反応物質と生成物質の両方が指定された場合、エネルギーツリービューには反応物質と生成物質との間で可能な反応経路が示されます。

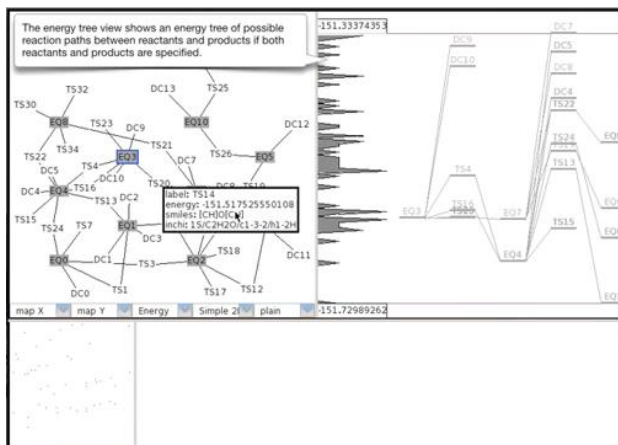


図 3 反応経路の探索

下部のパスリストには、可能な反応経路リストがテキスト形式で表示されます。パスリストで反応経路を選択すると、その反応経路がエネルギーツリービューで強調表示されます。

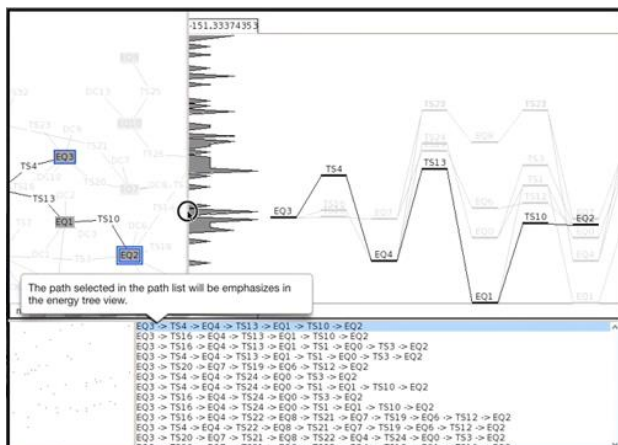


図 4 反応経路の選択

選択した反応経路を 3D アニメーションで表示することができます。

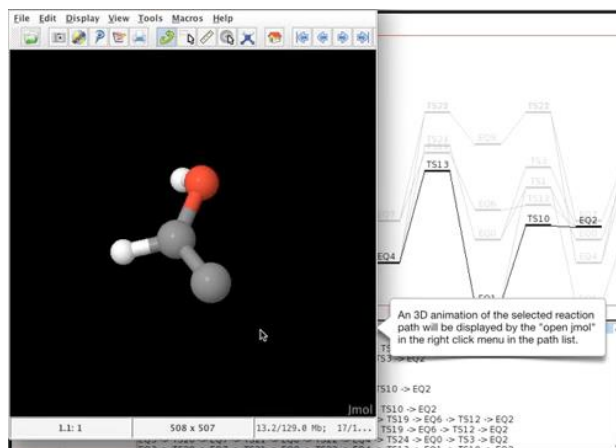


図 5 反応経路の 3D アニメーション

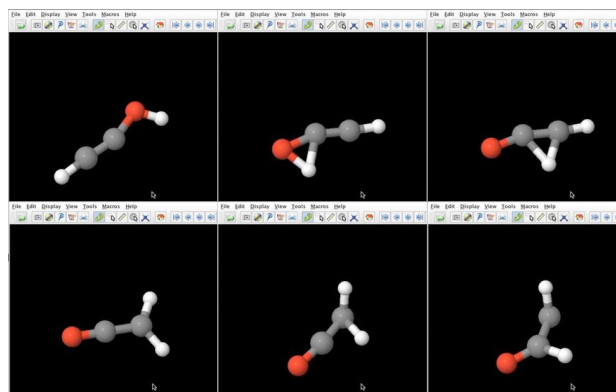


図 6 反応経路のアニメーション (続き)

◆最後に

脚注 3 には、以上の流れを説明した動画があります。また、Youtube に RMapView の他の動画もあります。

<http://www.youtube.com/channel/UCB8VM1myYo78e9Xun9lXIVQ>

創薬、バイオ、材料科学などにつながる研究です。注目して頂ければと思います。

夢を。



GSletterNeo Vol. 79

2015 年 2 月 20 日発行

発行者 ●株式会社 SRA 先端技術研究所

編集者 ●土屋正人

バックナンバーを公開しています ●<http://www.sra.co.jp/gletter>

ご感想・お問い合わせはこちらへお願いします ●gsneo@sra.co.jp

株式会社SRA

〒171-8513 東京都豊島区南池袋 2-3-2-8

夢を。Yawaraka Innovation
やわらかいのバージョン