



| | |
|------------|---|
| Title | ANCHOR II /BIORESEARCH |
| Author(s) | 高巢, 康秀; 坂本, 直人 |
| Citation | センターレポート, 18, pp.140-142; 1999 |
| Issue Date | 1999-03 |
| URL | http://hdl.handle.net/10069/25723 |
| Right | |

This document is downloaded at: 2018-02-25T05:44:22Z

ANCHOR II / BIORESEARCH

(株)富士通九州システムエンジニアリング 応用システム部 コンピュータケミストリ課
高巢 康秀(takasu@fqs.fujitsu.co.jp)、坂本 直人(sakamoto@fqs.fujitsu.co.jp)

ANCHOR II 概要

ANCHOR IIは、理論化学計算プログラムを計算エンジンとして分子力学計算や分子軌道法計算の入出力情報を簡単に作成し表示するシステムです。

ANCHOR IIは、以下の様な特徴を持っています。

1. 研究者の感覚を大切にしています。
分子構造データの入力、分子模型を組み立てる感覚で3次元的に行えます。また、紙に化学構造を書くイメージで2次元的に作成する事も出来ます。
2. 新たな発想を支援する強力な解析機能を持っています。
実験では、得られない各種の情報を計算により入手し、グラフィカルに表示します。また、文献から得られない情報も合わせて評価しますので研究者は、総合的に情報を判断できます。
3. 柔軟な分子設計を支援します。
分子設計は、解析結果を判断しながら繰り返し行われます。分子パレットを利用したANCHOR IIのサブシステム連携機能は、このような作業を容易にします。
4. 計算機能を有効に活用する解析データベース
計算の結果から得られる各種の情報は解析データベースで管理されます。同じ内容計算を何度も行う必要がありません。
5. 立体配座計算機能
エネルギー的に安定した分子の3次元構造を得る事は、計算化学の大きな目的のひとつです。ANCHOR IIでは、コンフォーマーの自動発生、重複構造の除去、計算結果の解析などの機能を持っています。

BIORESEARCH 概要

1. B I O R E S E A R C H / 3 S

B I O R E S E A R C H / 3 Sは、任意の蛋白質の部分構造と類似の構造を蛋白質立体構造データベース (PDB) から抽出し、モチーフの推定や機能部位の推定などの考察に利用することができるシステムです。

- 各種表示機能をサポートしています。
3 Sは以下の表示機能により、蛋白質分子を表示できます。
 - 立体構造表示・タイプ表示
 - アミノ酸残基一次配列表示・色分け表示
 - 部分拡大表示・Depthque (明暗による遠近) 表示
- 部分構造の検索が可能です。
指定された部分構造と類似した構造を持つ蛋白質部分構造を、蛋白質立体構造データベース (PDB) に登録されている蛋白質分子の構造から高速に表示できます。
- マルチストラクト機能をサポートしています。
検索された部分構造を持つ蛋白質分子の立体構造を、同時に表示することが可能です。
- マルチシーケンス機能をサポートしています。
検索された類似構造を持つ蛋白質分子のアミノ酸配列を、立体構造上一致した位置に合わせて表示することができます。
- PROSITE 検索機能および結果保存機能をサポートしています。
PROSITE データベースから、指定された PROSITE と同一の残基配列を持つアミノ酸配列を検索し、結果をファイルに保存できます。また、保存したファイルを用いて部分構造検索を行うことも可能です。

2. B I O R E S E A R C H / 3 M

B I O R E S E A R C H / 3 Mは、蛋白質の特定アミノ酸の置換効果を立体障害のチェックなどを行って調べることができるシステムです。

- 各種表示機能をサポートしています。
以下の各種表示機能により、蛋白質分子を表示できます。
 - 立体構造表示・タイプ表示
 - アミノ酸残基一次配列表示・色分け表示
 - 部分拡大表示・Depthque (明暗による遠近) 表示
 - スタイル表示・Color 表示
- 置換 (ポイントミューテーション) 機能をサポートしています。
簡単なマウス操作によりアミノ酸残基の置換を行えます。配列データと立体構造の連動表示が可能のため、置換される残基の指定は立体構造上はもちろん、配列

データ上からも行えます。

- 干渉チェック機能をサポートしています。
指定したアミノ酸残基のC α -C β を軸にして側鎖を回転させることができます。
これに伴う周囲の残基との干渉をチェックすることもできます。
 - Sound ……………干渉した場合、アラート音を出す
 - Color ……………干渉した部分と干渉相手の残基を発色させる
 - Action……………干渉した場合、側鎖の回転がストップする。
 - Sequence Check…干渉した場合、一次配列ウィンドウの干渉相手の残基種部分が発色する
- 原子間距離表示機能をサポートしています。
指定原子から一定距離内に存在する原子との距離、あるいは2つの原子間の距離を表示します。
- 簡易エネルギー計算が可能です。
指定したアミノ酸残基をC α -C β を軸として回転させる際の簡易エネルギー計算 (Lennard - Jones ポテンシャル計算) を行います。また、その簡易エネルギー計算結果を曲線グラフで表わします。