

分子骨格構造の三次元表示

鈴木 勇

1. 分子構造の表現

分子の構造を表現するには、どのような方法があるだろうか？メタンを例にとりあげてみよう。

普通メタンは CH_4 、または $\begin{array}{c} \text{H} \\ | \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ | \\ \text{H} \end{array}$ などと表記される。

前者ではメタン分子は、炭素1個と水素4個から構成されることがわかり後者からはさらに炭素のまわりに水素原子が結合していることがわかる。実際には、メタン分子は正四面体の各頂点に水素原子を配置し、その外接球の中心に炭素原子を配置した立体構造を有しており(図1)、上記のような表記法では、この立体構造のすべてを記述することはできない。メタン分子のような単純なものでさえそうであるので、このような表記法では、光学異性体、D体、L体および少し複雑な構造をもつ分子を表現しようとするときさまざまな問題が生じてくる。これらの問題を解決するために、いくつかの工夫された表記法[12][16]が考案されており分子構造の記述に用いられている。ここでは、三次元構造を記述するものとして最も一般的なものの1つである結合表と直交座標の組み合わせを見てみよう。(図2)

結合表とはいままでもなく、分子を構成する各原子間の結合関係を表にしたものである。結合表だけでは立体構造をユニークに表現することはできないが、三次元直交座標系と組み合わせること

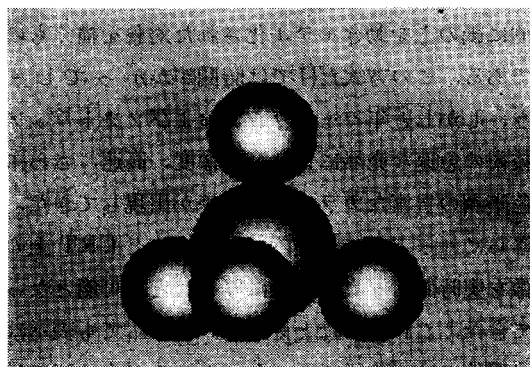


図1 メタン分子

により一意に表わせる。

以上のような表記法は分子の三次元構造を記述することは可能だが、必ずしも人が認識するのに適した表現形式とはいえない。そこで化学者がもち出してきたものは、三次元の模型である。[3]この模型もさまざまな種類が考案されており、それぞれの目的に応じて用いられている。しかし、対象とする分子がある程度以上の複雑さをもつと重力その他の関係で模型をとり扱うことは困難となる。さらに、たとえ対象分子が単純な構造であっても分子を形として人が認識する段になると模型だけでは十分とはいえなくなってくる。そこで

1	C	2	3	4	5	0.000	0.000	0.000	1.6
2	H	1	0	0	0	0.000	0.000	1.090	1.2
3	H	1	0	0	0	1.028	0.000	-0.363	1.2
4	H	1	0	0	0	-0.514	-0.890	-0.363	1.2
5	H	1	0	0	0	-0.514	0.890	-0.363	1.2

図2 メタンの結合表と直交座標、およびファンデアワールス半径

すずき いさむ (財)東京都臨床医学総合研究所

コンピュータグラフィクスによる分子構造の表現が力を発揮してくる。

2. 分子の三次元表示

2.1 コンピュータグラフィクス

コンピュータグラフィクスとは言うまでもなくコンピュータの中に対象の構造をモデルとして記述し、そのモデルを用いて対象を visual な形で CRT 上や紙の上に描くものである。描く装置も以前は XY プロッタが主流であった。これはペンが物理的に紙の上を動きモデル化された対象を描くものである。この方式だけでは時間がかかってしまう。しかし近年ハードウェアおよびソフトウェア技術の急速な発展により高解像度、高速、さらに色階調の豊富なカラー CRT 等が出現してきた。さらにハードコピー装置を併用すると CRT 上の像を実時間で写真や紙上に写すことも可能となってきた。これまでたとえ CRT であっても表示は本質的には二次元であった。ところが今は三次元ディスプレイも普及し始めており、対象を三次元空間の中でそのまま認識することが可能となってきた。ソフトウェアの技術もモデルの理論の進歩と同様に進んでおり、より Real な表示が試みられている。[3][4] 鏡面反射、乱反射、透過光の屈折等の効果を考慮したモデルも提出されている。[4]

2.2 分子表示のモデル

化学分野においてもコンピュータグラフィクスは盛んに利用されている。対象を分子とした場合にも多くのモデルが考案され化学研究者たちにより効果的に利用されている。ここでは分子の骨格構造を中心に着目し、その表示について見てみよう。

表 1

①	Skelton
②	Ball-stick
③	Space-fill
④	Dot

分子骨格構造表示のモデルとしては表1のようなものがこれまでに提出されている。[1][5][6][13][14]ところが、これらは1つのモデルで記述可能である。すなわち、原子を球と仮定し、原子と原子の結合を円柱で表現する。これは言うまでもなく②の Ball-Stick モデルであるが、ここで球の半径をファンデアワールス半径とすれば Space-fill モデルとなり、半径を0とし各結合を表わす円柱の直径を0とすれば、①の Skelton モデルとなる。結局、今のところ分子骨格構造の表示に関するかぎり、本質的には、1つのモデルで表現されているといえよう。3種類の表示例を挙げる。(図3, 4, 5)

2.3 分子表示のソフトウェア

分子の表示機能を組み込んだソフトウェアおよび分子表示のためのソフトウェアは、数多く開発されている。[2][7][8][9]特に前者についてみれば、分子構造をとり扱う情報システムでは、



図 3 Skelton 表示例

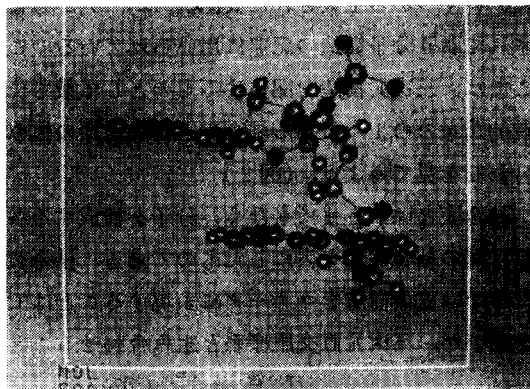


図 4 Ball-stick 表示例

表 2

- | | |
|---|-------------------------|
| ① | Rotation Translation |
| ② | Zoom in/out |
| ③ | Stereo View |
| ④ | Animation |
| ⑤ | Man-machine interaction |

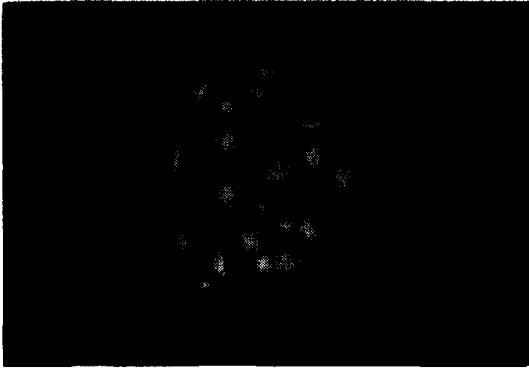


図 5 Space-fill 表示例

表示機能が必須といっても過言ではない。したがって後者の表示用のソフトウェアも移植性の高いものは、多くの情報システムで共通に使われることが多くなるわけである。ところが、コンピュータグラフィックスの場合、必ずしも、移植性をもったソフトウェア開発は容易でないことがある。まだグラフィックスの標準化が、完了していないためである。その中でも名古屋大学別府良孝氏の NAMOD[1]は QCPE[10]にも登録されており移植性の高い表示プログラムとして有名である。

さて表示用のソフトウェアに要求される機能には、どんなものがあるであろうか？ 普通は表2に挙げるものが基本的である。Rotation と Translationは、逆に言えば目の位置を対象に対して自由に変化させるものであり、Zoom in/outは視野の広さを変化させるものである。しかし単に Rotationといっても各ソフトウェアにより、その使用法は異なっており、回転の中心と回転角(x , y , z 各軸に関して)を与えるもの、回転をランダムに行なわせるもの、および、指定した結合のまわりの回転角を与えるもの等といろいろな方法がある。この中でもランダムな回転は、思いがけない視点を提供し、表示の効果を高めるようである。また Zoom in, Zoom out 機能により、対象とする分子の局所構造、大域構造を形として認識することが可能である。Stereo View は二次元と三次元の

橋渡しをするもので、両眼の視差を利用し、頭脳の働きによる立体視を実現させるものである。

(図6) Animation は、もちろんどのような表示機能をもつソフトウェアでも CRT の前にカメラを設置し、コマ撮りを行なえば、Animation film の製作は可能である。しかし少なくとも、Animation 機能をもつというためには、なんらかの形でコンピュータとカメラの撮影との同期をハードウェアで行なうこと、あるいは直接コンピュータにより Animation の作成および表示が行なえることが必要であろう。現在までのところこの機能をそなえたシステムはそれほど多くはない。最後の Man-machine interaction はいわゆる対話機能である。いくつかの表示システムはメニュー方式を利用しており、CRT 上のメニューから必要な Option をライトペンやカーソルで選択させるようになっている。一方コマンド方式では、Key-board から、コマンドを入力することにより、諸表示機能が実現されることになる。この場合、可能であれば両者の併用が望ましい。それぞれ一長一短であるからである。

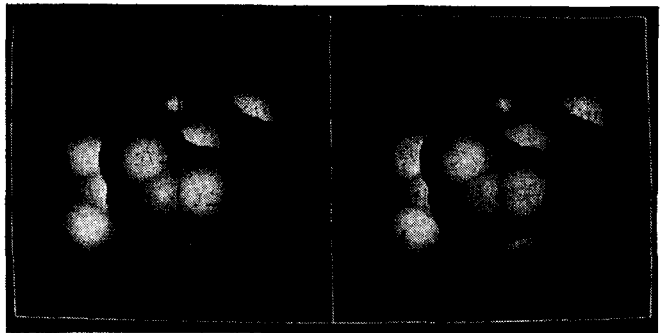


図 6 Stereo View 表示例

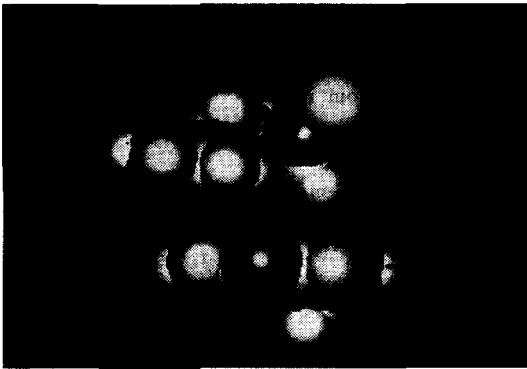


図 7 Z-DNA の base

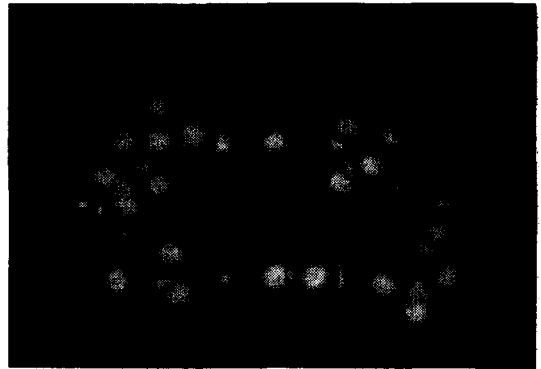


図 9 Open B-DNA

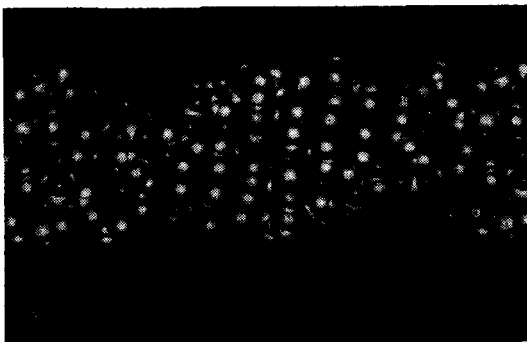


図 8 Z-DNA

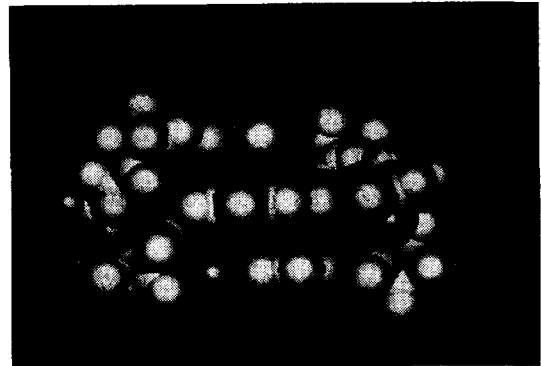


図 10 Open B-DNA+発ガン剤①

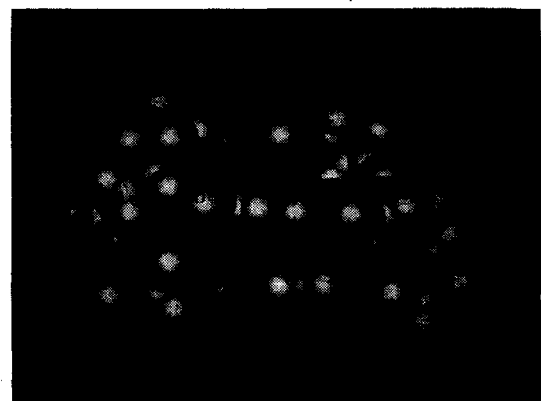


図 11 Open B-DNA+発ガン剤②

3. 応用例

前にも述べたように、表示は分子の構造を扱う場合、ほとんど必須な概念である。したがって応用としても、たとえば化学物質のデータベースおよびその検索、蓄積システム[7]、有機合成における支援システム[8]、配座解析システム[9]、その他諸々の構造をとり扱うシステム等でそれぞれ重要な機能を果たしている。筆者の属する研究グループでは、分子の機能と形との関係を解析するためのシステム MOSA (Molecular Shape Analysis System)を開発中である。MOSA では、表示が、基本的な機能として重要な役割を果たすことになる。この表示機能を用いた表示例を最後にいくつか挙げる。図7, 8は、MITのRich教授らが、Science[11]に報告して話題となった。Z-DNAの表示である。MOSAでは、このbaseの回転するAnimationの作成も行なっている。図9はB-

DNAのOpenなConformationの表示であり、図10は、このDNAに、発ガン剤が入りこむ寸前の状態を表示 (intercalation) したものである。図11では完全に入りこんでしまっている。このような状態の変化は、Animationによってのみ認識されるものであり、われわれもこのAnimation filmを製作中である。応用例は以上のようなもの

の他にたくさんあり、とてもこの紙面に収めることはできないが、表示が単に道具のみにとどまらず、研究者の発想そのものを刺激し、さらに新しい発見の手助けとなることを確信している。また、研究のためだけでなく、教育分野の応用を考えると、これもまた、これまでの化学教育の形態を一変することになると思われる。

最後に、ここでは分子の骨格構造の表示についてほんのさわりを紹介したにすぎないが、この他にも、電子密度分布の表示[15]、やエネルギー分布等、骨格構造以外の属性についてもその三次元表示が行なわれており、今後の化学分野では表示が基本的な道具としてその力を発揮すると思われる。

参 考 文 献

- [1] 別府良孝, “分子表示プログラム NAMOD について”, 名大大型計算機センターニュース, Vol.9, No.2, pp.123-134, 1978
- [2] Dyott, T. et al. : MOLY-An Interactive System for Molecular Analysis. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1980, 20, 28-35
- [3] 河口洋一郎 (編) : コンピュータ グラフィックスの世界, ASCII 出版, 1980
- [4] 柏木浩, 伊奈論, “カラーグラフィックスの分子科学への応用”, CBI ワークショップ第3回研究講演会
- [5] Langridge, R. et al. : Real Time Color Graphics in Studis of Molecular interactions, *Science*, Vol.211, No.4483, 1981
- [6] Max, N. : ATOMLLL-A three-dopaque molecular system, Lawrence Rivermore Lab. Rep. VCRL-52645
- [7] Marson, S. : MACCS について, CBI work shop 講演集, 1982
- [8] Pensak, : Tribble System について, CBI work shop 講演集, 1982
- [9] Potenzune, R. et al. : *Molecular Mechanics and Camseq Processor*, *Com. and Chemistry*, Vol.1, 187-194, 1977

- [10] QCPE. Catalog guide and index to QCPE, Vol.13, 1981
- [11] Rich, A. et al. : Left-handed Double Helical DNA : Variation in the Backbone Conformation, *Science*, Vol.211, 9, Jan, 1981
- [12] Smith, E. G. : The Wiswesser line-Formula Chemical Notation, McGraw-Hill, 1968
- [13] Smith, M. G. and Gund, P. : Computer-Generated Space-Filling Molecular Models, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, Vol.18, No.4, 1978
- [14] Warme, K. P. : Space-Filling Molecular Models Constructed by a Computer, *Computers and Biomed. Res.* 10, 75-82, 1977
- [15] Whitted, T. : An Improved Illumination Model for Shaded Display, *Com. ACM.*, 1982
- [16] Wipke, T.W. and Dyott, M. : Stereochemically Unique Naming Algorithm, *J. Amer. Chem. Soc.* 96, 15, 1974

●ミニミニ●

●OR●

売れているウイスキー

酒類のような醸造製品は、原料を寝かせる期間が長く、しかも品質の良いものほど長期間寝かせる必要がある。ということは、醸造業者は原料を寝かせる間だけ先を見越した需要に対応して仕込みをしておかなければならない。ところが最近の酒類、特に洋酒の需要は、数年前に原料を仕込む時期の予想より大幅に伸びているはずである。それでもウイスキー業者は需要を満たすだけ製品を供給しているということは、原料をなにかで水増ししているということにほかならない。つまり、よく売れているウイスキーは、どこかでインチキがあることになる。

このことはよく知られている事実のようだが、呑んべえは非OR的であるらしく、ほとんど誰もが意に介さない。ウイスキーを買うなら、売れ行きの良くない銘柄をおすすめする。
(小野章勝)