

# ラマチャンドランプロットの理解を目的とした 3DCAD の活用について

若杉 圭

秋田大学教育文化学部技術部

## 1. はじめに

タンパク質の構造変化のメカニズムを理解するためには、各アミノ酸残基が持つ2つの単結合に注目する必要がある。図1の $\Phi$ と $\Psi$ を横軸と縦軸にとった二次元平面にエネルギー値を表示したものは、ラマチャンドランプロットと呼ばれる。

本研究では、3DCAD で作成された分子モデルを使用して、ラマチャンドランプロットに対する理解を深める方法を検討した。

## 2. 分子モデリングにおける 3DCAD の利用

分子モデリング用の専門的なソフトは、すでに数多く開発されている。これらのソフトは、画面に表示された分子モデルに対して、回転や拡大縮小、移動などの操作ができ、さらにエネルギーの計算など、研究に有用な多くの機能が搭載されている。ただし、出力できる 3D データの形式は限られており、他の用途にすぐに利用できるわけではない。

そこで、著者は 3DCAD の利用について検討した。3DCAD で作成された分子モデルは、専門的なソフトと比較して、原子や結合部分の形状の自由度が高い。さらに数多くの 3D データの形式に出力可能なため、3D プリンタや VR など、様々な分野に用途を広げることができる。

今回紹介する方法では、スマートフォンを使用してアミノ酸残基の分子モデル(図2)を誰でも簡単に共有・操作できるようにした。

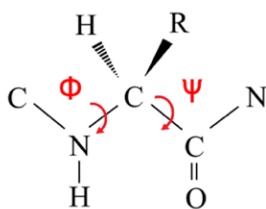


図1 アミノ酸残基が持つ2つの回転角

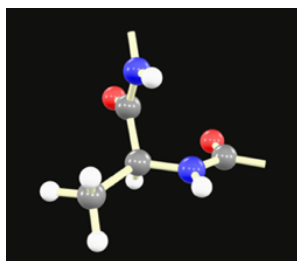


図2 3DCAD で作成されたアラニン残基の分子モデル

## 3. 手順

### 3.1 原子の座標の入手

まず、分子モデリング用のソフト「Spartan」により必要なモデルを作成し、分子を構成するすべての原子の三次元座標(x,y,z)を PDB 形式で出力する。

### 3.2 3DCAD による分子モデルの作成

得られた三次元座標を元にスクリプトを作成し、3DCAD ソフト「FreeCAD」のマクロ機能を実行して、分子モデルを再度作成する。

### 3.3 必要な 3D データの入手

この 3D データを「Autodesk Fusion」により USDZ 形式のファイルに変換する。さらに「Aspose.3D」により GLTF 形式のファイルに変換する。

### 3.4 model-viewer による表示

2つのファイル(USDZ, GLTF)をサーバに保存し、さらに「model-viewer」を使い、分子モデルの表示や操作が各種ブラウザ上で実行できるようにする。

## 4. 分子モデルの共有

今回、アラニン残基の $\Phi$ と $\Psi$ を、原点を基準にそれぞれ $60^\circ$ ずつ変化させ、合計36通りのコンフォメーションの3Dデータを作成した。

例として、右巻きヘリックスの領域( $\alpha$ )と、伸びた構造の領域( $\beta$ )のコンフォメーションをスマートフォンで表示するためのQRコードを図3に示す。これらのコンフォメーションでは、原子間の立体障害の影響が小さい安定な配置となっている。

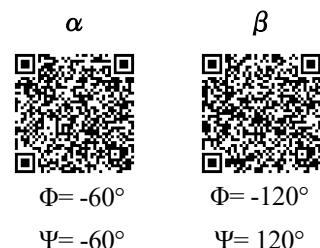


図3 コンフォメーションを表示するための QR コード