タンパク質立体構造情報データベースシステム
PSILO: 新機能

株式会社モルシス
木村　嘉朗

PSILO は、ウェブベースのインターフェースを持つタンパク質-リガンド複合体構造のデータベースシステムです。タンパク質立体構造データを整理して、多様なクエリーで検索可能にし、情報共有を支援します。

PSILO には、計算化学者、実験研究者、構造解析研究者などの専門家のニーズに応える様々な機能が搭載されています。例えば、計算化学者向けには、キーワード、相同配列、3D-相互作用、タンパク質類似ポケットなど、多様なクエリーによる複合的な検索できる機能があり、タンパク質立体構造データの効率的にアクセスすることができます。実験研究者向けには、研究対象とするタンパク質ファミリーのリガンド結合部位、リガンド構造、ポケット類似性などを基準に重ね合わせる機能があり、その結果を 3D 構造ビューワーで確認できます。構造解析研究者向けには、PDB フォーマットファイル以外にも、複数の構造因子ファイル、スケーリングログファイル、スケーリングデータファイル、TLS パラメータファイルなど関連付けてタンパク質立体構造データを管理する機能があります。また、システム管理者向けには、データへのアクセス権限をユーザーごとに設定できる機能があり、必要なセキュリティを確保できます。

最新の PSILO 2017.12 では、主に以下の新機能が追加されました。

- 軽快に動作する Javascript ベースの 3D 構造ビューワー：NGL 3D Viewer のサポート
- 独自の Javascript ベースの 2D スケッチャー：MOE Sketcher の搭載
- 主要組織適合遺伝子複合体（MHC）抗原と T 細胞受容体（TCR）、さらにそれらの複合体（MHC-TCR）のファミリーデータベースの管理機能
- PDB データのコンパクトなファイルフォーマット：Macromolecular Transmission Format (MMTF)フォーマットのサポート

本セッションでは、これらの PSILO の新機能を中心に紹介します。

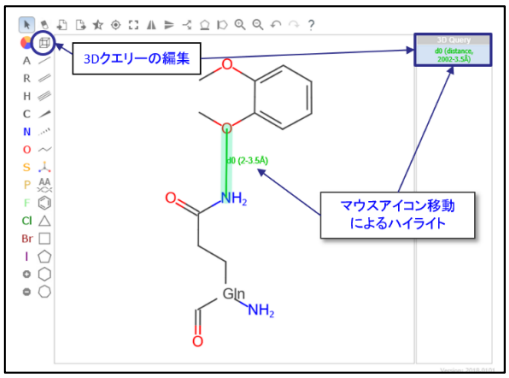

図 1. MOE Sketcher による 3D 相互作用検索のクエリー

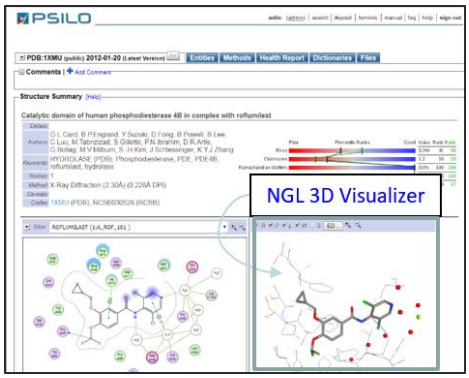

図 2. PSILO のレコード表示画面と NGL 3D Visualizer