

PSILOは生体高分子やタンパク質-リガンド複合体構造情報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、多様な条件で検索可能にし、データの共有を支援します。公共データやインハウスデータなどの分散するタンパク質立体構造データを統合し、ウェブベースのインターフェースから容易に活用することができます。本稿では、2016年末にリリースされました PSILO 2016.10の新機能を紹介します。

■レコード表示

■ Cootの起動

タンパク質結晶構造解析で利用される Coot¹⁾を PSILO から直接起動できるようになりました。各レコードや重ね合わせ結果を、PSILOの 3D Viewerで表示している状態を反映し Cootで表示することができます。

■クオリティーサマリー表示

レコード表示にクオリティーサマリーが追加されました。登録されているデータについて R_{free} 、原子衝突、ラムチャンドラプロット、ロータマーで問題が無いかを簡単に確認できます。また、全 PDB データや同様の解像度のデータとの比較も表示されます。

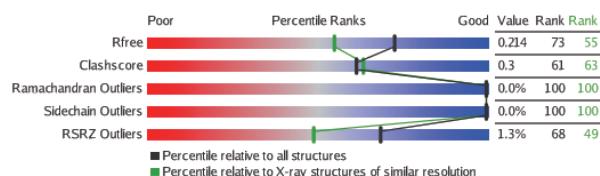


図1. クオリティーサマリー表示 (PDB ID: 5MEO)。

■電子密度マップ表示

構造因子 (F)、 σ A 値 (D)、figure of merit 値 (m) を利用した 2mFo-DFc や mFo-DFc マップの計算が可能になりました。2Fo-Fc や Fo-Fc マップに比べバイアスが除かれた電子密度マップを PSILO 上で表示できます。

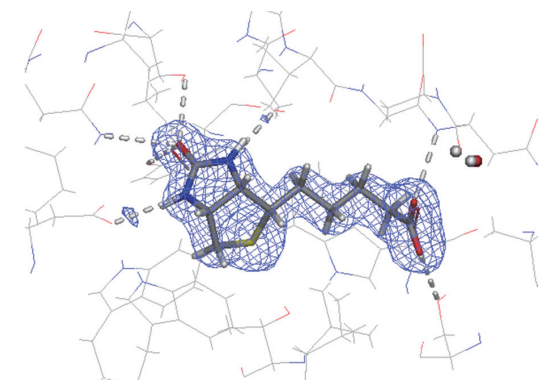


図2. 2mFo-DFc電子密度マップの表示 (PDB ID: 2RTD)。
水素結合を点線で表示。

■検索

■ 2Dスケッチャー

MarvinJSと BIOVIA Drawが新たにサポートされました。BIOVIA Drawでは 3Dクエリーも作成できます。

■リガンド類似度ソート

検索結果に表示されるリガンド図をクリックすることで、指定したリガンドとの類似度の順に並べ替えができるようになりました。

■3D 構造検索結果の重ね合わせ

3D 構造検索の結果を、用いたクエリーに対応する原子群と重ね合わせができるようになりました。PSILO 上で表示できる他、MOEやその他出力形式でも保存できます。

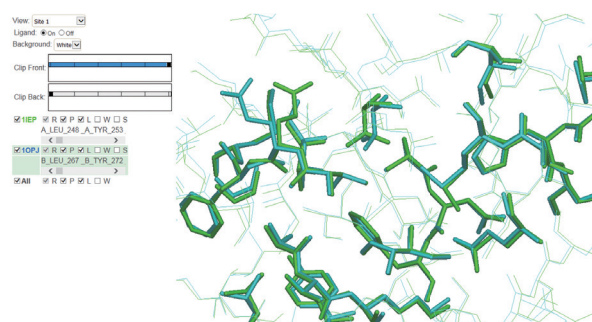


図3. C-ABLキナーゼのリガンド結合部位重ね合わせ結果 (PDB ID: 1IEP(緑)、10PJ(シアン))。

■ファミリーデータベース

複数のサブユニットから構成されるタンパク質のファミリーデータベース管理に対応しました。一部のサブユニットが存在しないデータや、サブユニットが重複して存在するデータも正しく登録されます。この更新に伴い、抗体データベースが新たに搭載されました。

■その他

■セキュリティの向上

PSILOから MOE/webサーバーへ httpsを利用した接続が可能になりました。MOE/webサーバー上の SVLと PHP間の通信のセキュリティが向上しました。また SVLでは外部への通信に cURL ライブラリを利用するようになりました。暗号化やプロキシがサポートされました。

■ウェブブラウザのサポート

Microsoft Edgeが新たにサポートされました。

1) Emsley, P.; *et al. Acta Crystallographica Section D: Biological Crystallography* **2010**, 66 486-501.