

# PSILO 販売開始

PSILOは、PDBデータ、in-houseデータ、モデリングデータなどのタンパク質立体構造データを統合的に管理するデータベースシステムです。Webベースのインターフェースを搭載し、実験研究者、構造解析研究者、モデリング研究者が、それぞれ必要なデータを即座に参照することができます。

## タンパク質立体構造の登録

### ◆構造データの登録

結晶構造データや、モデリングデータ、ドッキングシミュレーションデータなどの社内データをWebベースのインターフェースを使って登録することができます。大量のデータはコマンドを使って一括登録できます。また、PDBデータは毎週自動アップデートされます。PDBファイルに含まれるタンパク質立体構造データ以外の情報（結晶格子、バージョン、文献情報など）も自動的に取り込まれます。

### ◆自動アノテーション

UniProtへの相同配列、InterProのドメイン情報、GeneOntologyへのアノテーションを自動的に設定します。

## データの検索と可視化

### ◆様々な検索条件

検索クエリとして、キーワード、PDBコード、リガンドの部分構造／類似構造、相同アミノ酸配列、アノテーションなど、多様な条件を複合的に設定することができます。また、ユーザが頻繁に利用する検索条件は保存することができます。

### ◆データの表示

メインページに構造データが2次元、3次元表示されると共に、各種アノテーションや文献へのリンクが表示されます。ユーザはクリックするだけで、公共データベースの関連情報を参照することができます。電子密度データも自動的にダウン

ロードしているため、電子密度マップを描画することもできます（図1）。

また分子ごとの詳細表示では、タンパク質のアミノ酸配列について、類縁配列とのアラインメント情報や、リンクを表示します。リガンドについては、SMILESやInChI形式で表示するので、公共の化合物データベースの検索を即座に行うことができます。

タンパク質立体構造のジオメトリチェック機能では、phi-psiプロットの表示や残基ごとの二面角エネルギー、接触エネルギーのプロットを表示します。

さらに、複数の相同タンパク質を重ね合わせて表示することができます。構造ベースの配列アラインメントをMOEの機能を利用して自動的にを行い、アラインメントにしたがって重ね合わせます（図2）。重ね合わせ構造は、リガンドの結合部位ごとにハイライトして表示することができます。実験研究者は、複雑な操作を行うことなく、共通の相互作用部位を即座に見出すことができます。

## データのバージョン制御

データ登録時には、データの更新と新規登録を選択することができます。データを更新した場合は、古いデータは残されますが、検索には最新データのみがヒットします。データには、対話形式のコメントを残したり、編集項目をハイライト表示することができます。

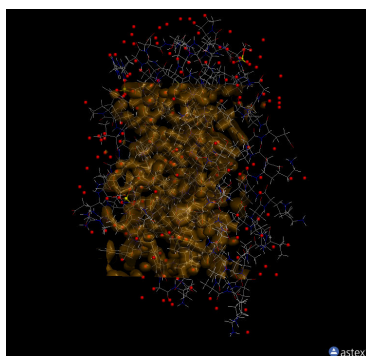


図1 電子密度マップ表示

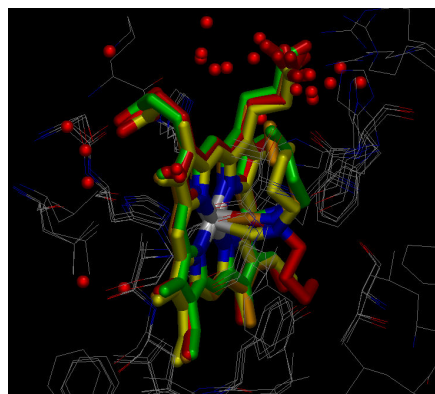


図2 活性部位の重ね合わせ表示