

PSILOの解析機能

PSILOは、PDBや社内のタンパク質立体構造情報を一元管理し、共有することのできるデータベースシステムです。PDBデータ内の情報は、注釈情報も含めて全て登録され、Webインターフェースから参照することができます。また、電子密度や、タンパク質立体構造の重ね合わせ構造を表示します。さらに、アノテーション情報を事前に計算しておくことにより、個々のタンパク質関連情報の外部データベースへの検索の手間を省くことができます。

注目部位の自動登録

タンパク質の活性部位や、抗体の相補性決定領域（CDR）などのタンパク質内の注目部位を自動検出し登録します。各部位はリスト化され、リスト選択と3D表示が連動し、着目部位の立体構造を即座に参照することができます。

アラインメントのグラフィカル表示

PDBデータとUniProtの関連配列データとのアラインメント情報をグラフィカルに表示します（図1）。

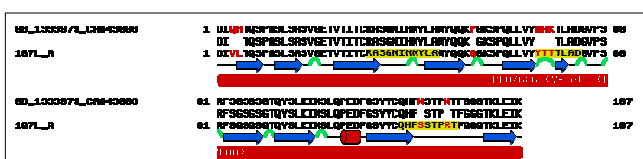


図1 アラインメント表示：配列の相違部、CDR、活性サイトを色分けで表示します。二次構造や参照データをグラフィックスで表示します。

電子密度マップ表示

Fo-Fc、2Fo-Fcなどの電子密度マップを表示することができます（図2）。リガンド結合部位などを詳細に検討することができます。



図2 電子密度マップ表示：1B6Nと1Z1Hの電子密度マップ。1B6Nの赤丸部分には、電子密度があるが原子が存在しない。1Z1Hでは修正されており、リガンドの原子が存在する。

独自の活性サイトに指向した構造アラインメント

MagicAlignという独自の活性サイトに指向したアラインメントアルゴリズムで、活性部位とリガンドを基準にしてタンパク質を重ね合わせます（図3）。複数の分子鎖からなるPDBデータの場合でも、最も良く重なる分子鎖を探索し、さらにその中から活性部位を検出します。重ね合わせ状態の座標情報を持つPDBファイルとして保存することができます。

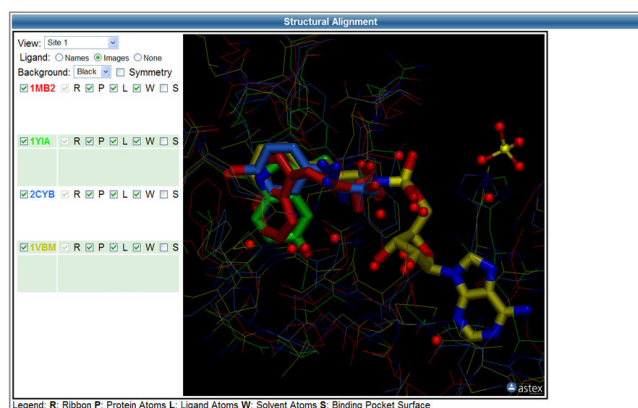


図3 タンパク質の重ね合わせ構造表示

自動アノテーション

BLASTとInterProScanを組み込むことができるので、タンパク質構造データに対して様々なアノテーション情報を付加することができます。BLASTを利用してPSILOに登録されている配列データに対して相同配列を検索するほか、UniProtのデータベースに対する相同配列のアノテーション情報を付加します。また、InterProScanの計算から、PROSITE、PRINTS、PIR superfamily、SUPERFAMILY、Pfam、ProDom、SMART、TIGRFAMs、Gene3D、PANTHERという多数のアノテーション情報を付加します。それぞれのアノテーション情報は各サイトにリンクされ、関連情報を即座に参照することができます。