

タンパク質立体構造情報データベースシステム

PSILO 2011.09リリース



昨年10月に、タンパク質立体構造データベースシステムPSILOの新バージョンがリリースされました。バージョンアップでは、3D相互作用検索結果の統計グラフの表示とそれによるデータの絞り込み、類似ポケット検索へのPDBクエリーの利用や予測されたリガンド結合ポケット(ドラッグライクポケット)に対する検索など、タンパク質立体構造データをより活用するための機能強化がなされました。ここではPSILOの新機能についてご紹介します。

■PSILOとは

PSILOは、Webベースのタンパク質立体構造のデータベースシステムです。増え続ける公共のタンパク質立体構造データとin-houseデータを統合管理することにより創薬研究を支援します。

登録したタンパク質立体構造データについて、重要残基リストやドラッグライクポケット構造テーブル、InterProScanによる多様な配列アノテーションなど、様々な関連情報を付加します。

また、様々な手法によるリガンド結合部位でのタンパク質立体構造の重ね合わせや、リガンド結合状態の比較など、タンパク質の活性部位にフォーカスした解析機能を提供します。

■類似ポケット検索の機能向上

PSILOの類似ポケット検索は、タンパク質のアミノ酸配列や折りたたみ構造の類似性に関係なく、タンパク質の活性部位におけるアミノ酸残基の立体的な位置関係が似ているデータを検索することができます(図1)。

リガンドが含まれていないタンパク質立体構造でもドラッグライクポケットを自動認識して、類似ポケット検索の対象にすることができます。

また、タンパク質の部分構造をPDBフォーマットでコピー&ペーストすることにより、任意のポケット構造をクエリーとして検索できます。

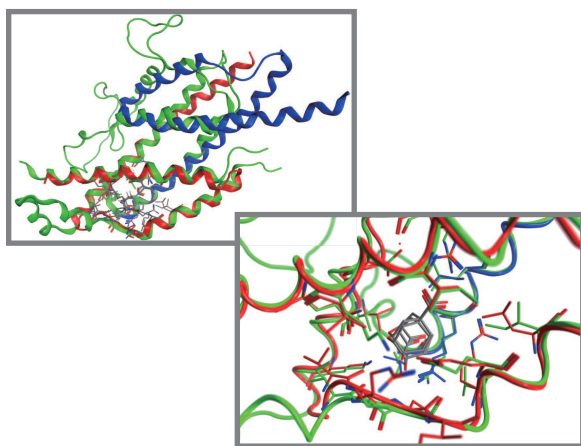


図1: PSILOで検索した類似ポケット構造

PDB: 1ECM (赤、青)と4CSM (緑)のポケット部分の重ね合わせ。
分子全体では重ならないが、ポケット部位は良く重なる。

■3D相互作用検索と検索結果の解析

分子構造スケッチャ上で原子間距離、結合角、二面角などの情報を加えて、3D相互作用検索のためのクエリーを作成することができます(図2左)。

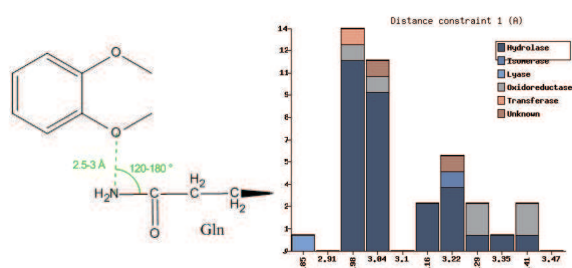


図2: 3D相互作用検索のクエリー(左)と結果ヒストグラム(右)の例

3D相互作用検索の結果について、タンパク質の機能や各ジオメトリ情報などに基づいてヒストグラムを作成し、検索結果から更に絞り込むことができます(図2右)。

■ファミリータンパク質の自動収集

アミノ酸配列アラインメントファイルを登録しておくことで、ファミリー構造データを自動収集します。ユーザーが興味を持つファミリータンパク質のクラスターを常に最新の状態に保つことができます。

各タンパク質立体構造データには、ファミリー内で重ね合わせるための回転、並進行列の情報が表示され、ファミリーの重ね合わせに活用することができます。

■MOEのデータベース更新機能

MOE 2011.10では、内蔵の専用プログラムにより、MOEの抗体データベース、キナーゼデータベース、GPCRデータベースをPSILO経由で更新することができます。

更新時には、各配列アノテーションやクラスタリングが自動的に行われます。ユーザーはMOEのローカルデータベースにin-houseデータを組み込み、最新の公共データと合わせて、常に新しいタンパク質立体構造データを活用することができます。

■PSILOのデモサイト

ご購入を検討されるお客様のために、今回ご紹介した3D相互作用検索や類似ポケット検索など、PSILOのフル機能をお試しいただけるデモサイトをご用意しております。ご希望の方は弊社サポート窓口までご連絡ください。