

タンパク質立体構造情報データベースシステム

PSILO 2012.11リリース



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。ここでは、今秋リリースされましたPSILO 2012.11の新機能を紹介します。

■レコード表示

■選択可能な2D相互作用図

2D相互作用図内の原子、残基、結合が選択できるようになりました。選択した各オブジェクトはハイライトされ、選択情報は3D表示に反映されます(図1)。これによりユーザーは、より簡単に2D相互作用図で興味のある部分を3D構造で確認できるようになりました。

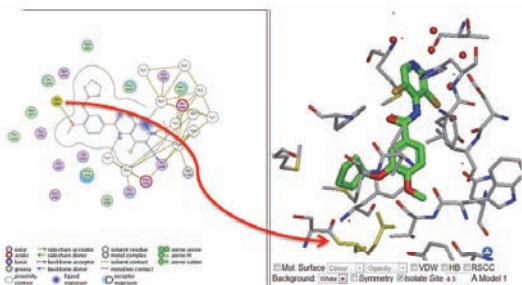


図1 原子、残基、結合が選択可能になった2D相互作用図。選択部分は黄色くハイライトされる。

■生物学的会合体 (biological assembly) のダウンロード

PDBファイルに含まれる単位構造を、PDBファイル内の「REMARK 350」行に記載される回転、並進行列に基づいて座標変換を行い、そのタンパク質が生体内で働く会合体を構築した立体構造情報をPDBファイルとしてダウンロードすることができるようになりました。

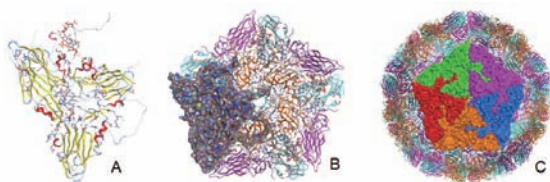


図2 PDB: 1QQP (手足口病ウイルスのオリゴ糖受容体)の会合体。A: 正20面体の非対称単位。B: 結晶非対称単位。C: 生物学的会合体。

■検索

■類似二次構造検索

タンパク質の二次構造の空間配置の類似性によりタンパク質立体構造を検索する機能が新たに加わりました。この検索では、タンパク質立体構造内の α ヘリックス、 β シートをベクトルでモデル化し、そのベクトルの配

置の類似性を評価します。アミノ酸配列に全く依存しないので、非常に遠縁なホモログ、アナログタンパク質を検索することができます。この検索機能は、APIコマンドから実行することができます。

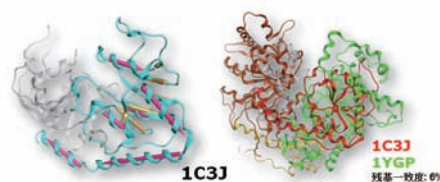


図3 類似二次構造検索例。残基一致度が非常に低いタンパク質でも検索することができます。

■BLAST検索結果の要約ページ

BLAST検索を行った後に、検索でヒットしたアミノ酸配列のクラスタリングや、配列アラインメントを表示する機能が加わりました。クラスタリングの手法は、近隣結合法とUPGMAから選択することができます。配列アラインメントはMSFまたはCLUST形式でダウンロード可能です。また、クラスタリングと配列アラインメントで互いにエントリーの選択が反映されます。



図4 BLAST検索結果の要約ページ

■データ登録

■GPCR/キナーゼアノテーション

PSILOにGPCRが登録されると、自動的にGPCRであることを認識して、膜貫通領域やファミリー、サブファミリーなどのアノテーション情報を付加する機能が加わりました。

また、キナーゼについては、DFGループのin(活性)/out(不活性)の判定がより正確になりました。

これらのアノテーション情報は、MOE用のMDBファイルに出力されるので、MOEで利用する各ローカルデータベースを常に最新の状態でご利用頂くことができます。