

タンパク質立体構造データベースシステム

## PSILO 2014.02リリース



PSILO (サイロ) 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、情報共有を支援します。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アクセスすることができます。ここではPSILO 2014.02について新機能を中心に紹介します。

## ■検索

## ■検索結果のURLによる共有

PSILOには類似ポケット検索(図1)や3D相互作用検索など、高度な検索機能が搭載されています。これらのクエリーを組み合わせて検索すると比較的時間がかかるため、以前のバージョンではブラウザを開いた状態で待つ必要がありました。

しかし、PSILO 2014.02では、検索結果を表示する為のハイパーリンクを電子メールで送信しますので、長時間の検索の実行中に画面を閉じて待つことができるようになりました。また、この検索結果の電子メールを他のユーザーに転送することで、検索結果を共有することができます。

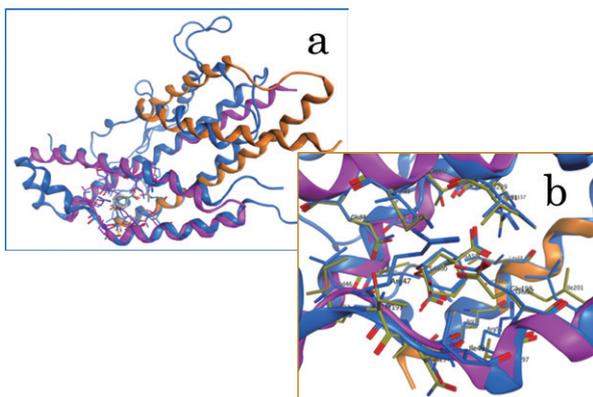


図1 PDB ID: 1ECM(橙、紫)と4CSM(青)のポケット構造を基準とした重ね合わせ。分子全体(a)では折り畳みの類似性が低い、リガンド結合部位(b)ではアミノ酸残基の立体配置が良く似ている。

## ■検索結果のリガンド構造のホバーポップアップ

PSILOの検索結果表示で、リガンドの2D構造にマウスオーバーした時に、リガンドの2D構造が拡大されるようになりました(図2)。これにより、目的のリガンドを探し易くなりました。

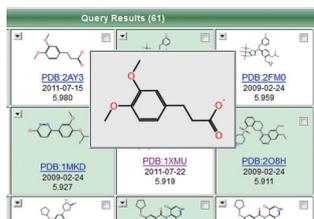


図2 検索結果表示のリガンドのホバーポップアップ。マウスオーバーすると、リガンドの2D構造が拡大される。

PDB ID: 2ZGA

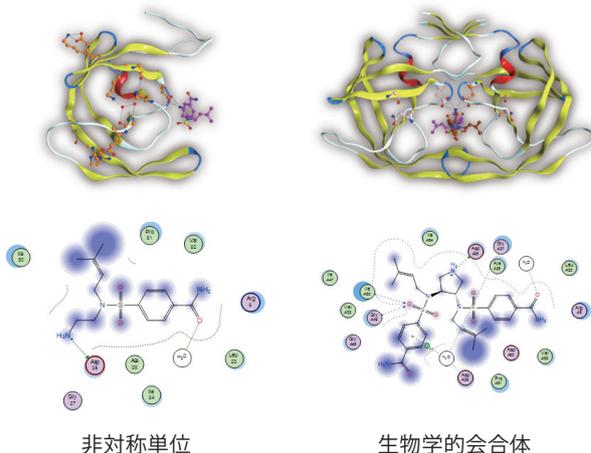


図3 PSILOによる非対称単位の分子構造の自動変換。ユーザーのデータ参照時は、生物学的会合体として表示される。

## ■データ登録

## ■非対称単位のリガンドの表示

PDBデータには、PDB ID: 2ZGAのように完全な分子構造でなく、非対称単位の分子構造とその変換行列だけが保存されているものがあります。このような分子構造データの場合、PDBファイルの原子座標データだけでは、正確に結晶構造モデルを表示できません。

PDBファイルに非対称構造が含まれている場合には、PSILOは自動的に変換行列を読み取り、分子構造に対して結晶学的対象操作を行うことで、生物学的会合状態の分子構造モデルを表示します(図3)。

## ■Mogulによる低分子配座の妥当性の評価

Mogulを購入されていて利用可能な場合、低分子のX線結晶構造の統計データに基づく結合長、結合角、二面角の妥当性を評価します。

## ■まとめ

PSILOは、最新のタンパク質立体構造データとユニークな検索機能、独自の解析機能を提供し、MOEユーザーをはじめとする全ての創薬、生命科学研究者を強力支援します。