

Protein Detail

タンパク質の関連情報を検索、詳細情報へリンク	
Query	
Keyword	Protein Name
Keyword	Entry Name
ID	UniProt Accession
Output	
タブ名	解説
Summary	UniProt Accession/該当遺伝子/ Target Family/Enzyme/ Target Assay & Activities
PDB	<p>タンパク質の結晶構造 (PDB) とその詳細へのリンク (PDB ID/Title/Ligand/Source/Resolution)</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ PDB タブでは当該遺伝子に紐づくタンパク質の結晶構造 (PDB) が表示されます。PDB ID/Title/Ligand/Source/Resolution のテーブルで纏められ、PDB ID をクリックすると 当該 PDB の詳細情報ページ、ファイルの出力、関係サイトへの PDB 関連リンクがあります。 ✓ <u>PDB 関連リンク</u> <ul style="list-style-type: none"> Details: PDB Details ページへ Link to PDB: Protein Data Bank (外部) の Web サイトへ Download PDB File: 当該 PDB ファイルのダウンロード Link to Binding DB: PDB Entry に 紐づく Binding DB サイトへ Search UniProt Entry > LSKB: Go To MOE: CCG 社の MOE により この PDB ファイルが開きます。 ※ MOE のライセンスと svl による LSKB との連携設定が必要です。
Annotation	<p>Feature(Type/ID/Position/Description/rsID/PubMed/Variation), Gene Ontology, Reference(literature), Domain</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Feature タブでは 当該タンパク質の配列に紐づく情報が Type/ID/Position/Description/rsID/PubMed/Variation として テーブル出力されます。 ✓ GO Function タブでは当該タンパク質に関連する Gene Ontology が出力されます。 ✓ Reference タブでは、当該タンパク質の基礎文献が表示されます。 ✓ Domain タブ Pfam /InterPro のドメイン情報が表示されます。
Similar Protein	<p>ポケット類似性、配列類似性での類似タンパク質情報 Known Binding Sites/Putative Binding Sites, CD-hit/BLAST/RPS-Blast/DELTA-BLAST</p>



	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Similar Protein タブでは 類似したタンパク質をリストアップしており、PDB の情報を解析した Possum 1) による Known Binding Sites/Putative Binding Sites での類似した件数、配列での類似性 (CD-hit/BLAST/RPS-Blast/DELTA-BLAST)による類似の有無をテーブル表示されます。 ✓ テーブルの内容は次のとおり <ul style="list-style-type: none"> Known binding sites: 既知のリガンド結合サイトに形状類似した PDB の Chain 数 Putative binding sites: Cavity など結合可能なサイトに形状類似した PDB の Chain 数 CD-Hit (LV=1): CD-Hit (Level=1) における配列の類似性 CD-Hit (LV=2): CD-Hit (Level=2) における配列の類似性 BLAST: Blast における配列の類似性 RPS-BLAST: RPS-Blast における配列の類似性 DELTA-BLAST: DELTA-Blast における配列の類似性
Drug	タンパク質をターゲットとする化合物(LSKBChemID/構造/分子量/Molecule Type/Mechanism of Action/Action Type/Phase /Withdrawn/ATC Class)
Disease	<p>タンパク質をターゲットとする疾患のクラスと開発状況とともに表示</p> <p>開発フェーズごとの疾患を進行状況が高い順にテーブル出力 (Total Count/# of Experimental/MeSH Tree//TTD ID/Info)</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Disease タブでは左側に当該タンパク質がターゲットである疾患のクラスが開発状況(後期 Phase4/3 および 早期 Phase2/1)と疾患の開発状況の件数をスライダーで調整し表示されます。 ✓ 右側は 疾患の開発状況 (P-4/P-3/P-2/P-1)とその Total Count/# of Experimental/MeSH Tree//TTD ID/Info の情報がまとめられ、進行状況が高い順にテーブル出力されます。 ✓ テーブルの内容は次のとおり <ul style="list-style-type: none"> Total Count: P-4 から P-1 までの合計 P-4: 上市 の薬剤件数 P-3: Phase 3 の治験薬件数 P-2: Phase 2 の治験薬件数 P-1: Phase 1 の治験薬件数 # of experimental: P-3 から P-1 の件数 MeSH Tree: MeSH の疾患分類 OMIM: OMIM 記載の有無 MedGen: MedGen 記載の有無 TTD ID: Therapeutic Target Database ID G2P: Guide To Pharmacology
Assay	<p>Single Protein Assay は Binding Assay 情報を化合物毎に表示 (化合物名/構造 /ID/EC50(pAct)/KD(pAct)/IC50(pAct)/Ki(pAct)/ZINC ID/PDB)</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Single Protein Assay タブでは 当該タンパク質をターゲットにする Binding Assay 情報を化合物毎に活

性値も取りまとめてテーブル形式で表示されます。テーブルには 化合物名/構造/ID/EC50(pAct)/KD(pAct)/IC50(pAct)/Ki(pAct)/ZINC ID/PDB が纏まっており、活性値や購入可能な化合物 Drug などで Filter が可能です。

Assay 情報 は Assay Type/Act Outcome Method/Title/Protein/Relationship Type/Confidence Score/BAO Format/Activities 数/化合物数/Details

✓ Assays タブでは 当該タンパク質ターゲットにする Assay 情報がテーブル形式で表示されます。テーブルには Assay Type/Act Outcome Method/Title/Protein/Relationship Type/Confidence Score/BAO Format/Activities 数/化合物数/Details へのリンク が纏まっています。

Activities は、Assay に付された化合物とその活性値情報を表示 (LSKB Chemical (構造) /Target/Activity Status/Activity Type/ Relation/Value/Units/pACT/Assay Value/Assay Type/Act Outcome Method/Title/PubMed/Comment)

✓ Activities タブでは、Assay に付された化合物とその活性値情報をテーブル形式で纏めています。LSKB Chemical (構造) /Target/Activity Status/Activity Type/ Relation/Value/Units/pACT/Assay Value/Assay Type/Act Outcome Method/Title/PubMed/Comment が、纏まっています。

✓ 注) 件数の多い Activities 情報はバッチ処理を行います。

OK を押して暫くお待ちください。終了後、テーブルが現れます。また、この結果は保持されるため 2 回目以降は早く表示されます。