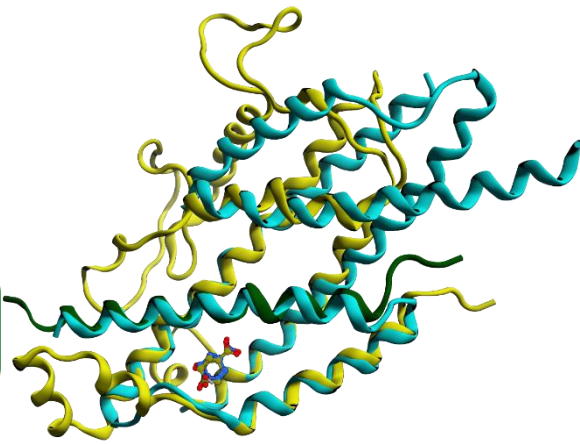


# PSILO



PSILO は生体高分子やタンパク質ー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。

## 検索

### 高速なテキスト検索

単語のインデクシングによる Google ライクな高速なテキスト検索。

### タンパク質／抗体アミノ酸配列検索

BLAST を内蔵しており、タンパク質、抗体の重鎖／軽鎖にターゲットを絞った配列検索が可能。

### 類似ポケット構造／類似二次構造検索

配列やフォールディングに依らず、類似の活性部位や類似の二次構造モチーフを持つタンパク質を検索。

任意のポケット構造や部分構造をクエリとして利用可能。

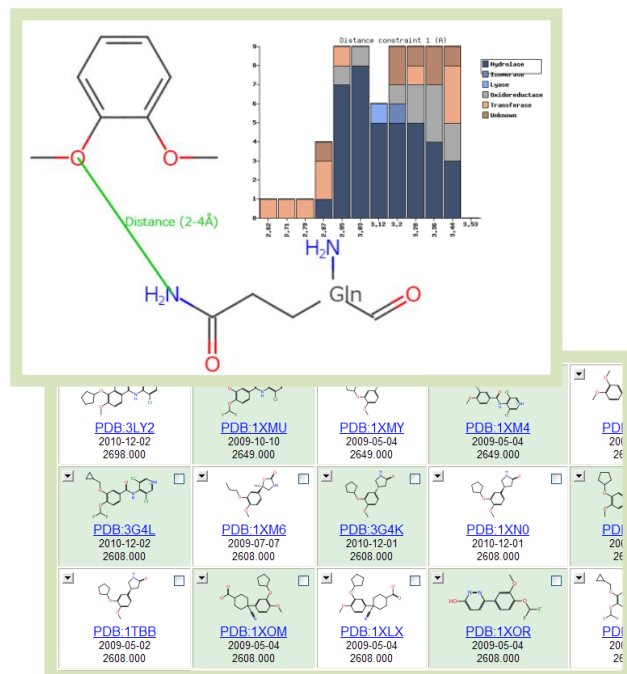
### 3D 相互作用検索

タンパク質ーリガンド間の原子間距離、角度、二面角を指定による、タンパク質立体構造検索。

検索結果の統計情報を表示。

### 化合物部分構造・類似構造検索

独自のスケッチツールや ChemDraw など構造を指定し、リガンドの構造検索が可能。



## タンパク質立体構造の重ね合わせ

### タンパク質立体構造全体の重ね合わせ

リガンド結合部位に重み付けした配列アラインメントを基準に重ね合わせ。

### ポケット類似性による重ね合わせ

配列に依らずリガンド結合部位において、同じ性質を持つ残基が一致するように重ね合わせ。

### リガンド構造による重ね合わせ

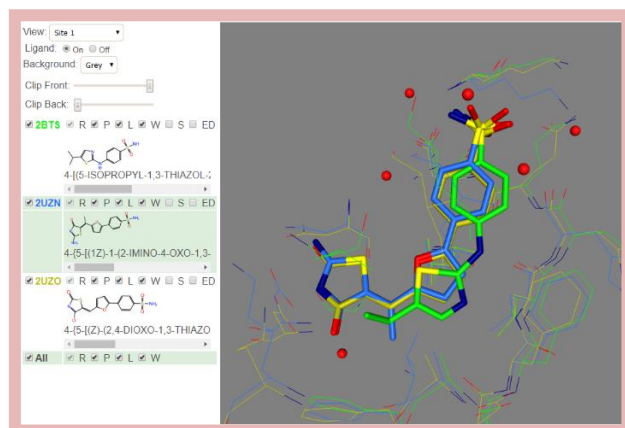
低分子の構造アラインメントによる重ね合わせ。

### 重ね合わせ構造における相互作用の比較

比較する2つの2D相互作用図を作成して、タンパク質ーリガンド相互作用の違いを分かりやすく表示。

### 重ね合わせ構造の MOE への読み込み

重ね合わせ構造を MOE に取り込み、より詳しい解析が可能。



## データ表示

### リガンド結合部位の 2D/3D 表示

リガンドごとに、タンパク質のリガンド結合部位について、選択が連動する 2D/3D 図を並べて表示。

### 電子密度図の描画

2mFo-DFc 図などの電子密度の等値面を 3D 描画。

### タンパク質立体構造のヘルスチェック

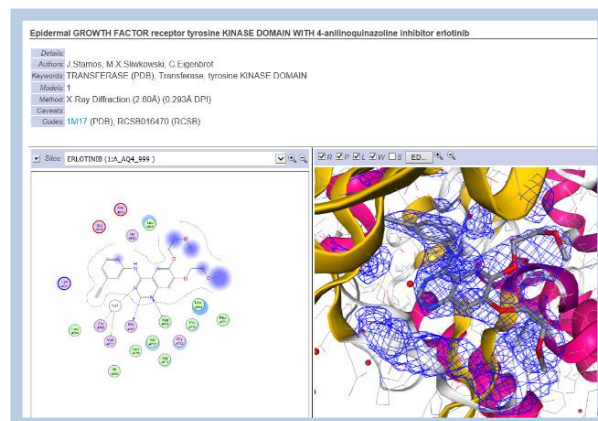
残基ごとの主鎖二面角 ( $\phi$ ,  $\psi$ ) や側鎖の配座エネルギーなどの表示による、タンパク質立体構造としての整合性チェック。また、残基ごとに電子密度データとの相違をプロット。

### タンパク質機能部位のアノテーション

活性部位の残基、抗体の CDR、キナーゼの各種モチーフ、GPCR の膜貫通ヘリックス領域の残基リスト表示。

### アミノ酸配列のアノテーション

InterProScan、SCOP を用いた、GO、ファミリーなど多数の配列アノテーション。



## データ更新とバージョンコントロール

### PDB データの自動更新

毎週 PDB データの更新に合わせて、自動的に最新データに更新。個々の PDB データの更新履歴が確認可能。

### インハウスデータの簡単な登録

インハウスの X 線結晶構造や、タンパク質モデル構造、ドッキングシミュレーションデータなどを登録可能。ユーザーによる個別登録や、バッチ処理による一括登録。

### コメントフォーラム

エントリーごとに、掲示板形式のコメント欄に構造データの修正情報など、任意のコメントの書き込みと閲覧。

Comments (1 pending request)   + Add Comment				
modeler	2018-06-04 18:34:38	Please update the external references to include a link to the corporate database entry for the ligand.	Respond	X
modeler	2018-06-04 18:32:15	I believe the chosen ligand tautomer is incorrect. Based on the local hydrogen bond network, the keto-form seems more likely than the enol-form.	Respond	X
xtaluser	2018-06-04 18:33:16	I have recomputed energies for the two possible tautomers, and the keto-form does have the lower energy as suggested. The ligand structure has been corrected accordingly.	Respond	X
xtaluser	2018-06-04 18:31:36	The ligand corresponds to LIGDB:1535 of the corporate ligand database.	Respond	X

## システムと動作環境

- HTTP ベースのアプリケーションプログラムインターフェース (API) を提供
- MySQL<sup>®</sup>または Oracle<sup>®</sup>を使用
- MOE/batch (1 トークン以上) を使用

### ハードウェア

OS: RHE Linux 6.4 以上 / CPU: Intel Xeon 2GHz マルチコア以上 /  
メインメモリ: 1 コア当たり 2GB 以上、合計 12GB 以上 /  
HDD: 2TB RAID 1 ディスクアレイ、1TB 以上の空き容量

### ネットワーク環境

PDB (PDBj) サイトへの FTP 接続



Chemical Computing Group 社 日本総代理店

株式会社モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀 3-19-9 ジオ八丁堀

TEL: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031

URL: <https://www.molsis.co.jp/> E-mail: [sales@molsis.co.jp](mailto:sales@molsis.co.jp)