

digzymeによる酵素インフォマティクスサービス

酵素活性ポケット予測

“酵素活性ポケット予測”では、ご指定の酵素の立体構造から基質が結合するポケットの位置を予測します。入力に必要な酵素の立体構造には、公開データもしくは一次配列から予測した構造を利用できます。

酵素の立体構造から基質結合部位を予測

先行研究と比較してもより高精度に酵素の活性部位ポケットを判定

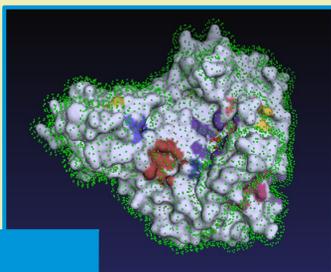
ご用意いただく情報

酵素の立体構造データ



探索結果

基質とポケット周辺 残基の側鎖を動かし、可能な複合体ポーズを複数出力



予測スコア

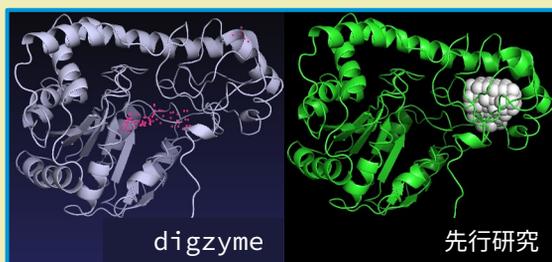
pocket	スコア
pocket1	0.703
pocket2	0.082
pocket3	0.024
pocket4	0.029
pocket5	0.100

ポケット毎に、基質結合部位である可能性を予測スコアとして出力

	予測値	
	ポケット	not ポケット
実際にポケット	163	21
実際にポケットではない	10	940

実行例：アスパラギン酸アミノ基転移酵素

digzymeモデルでは、基質結合部位を正しく判定できている（左図）が、先行モデル（PUNet*、右図）では異なる空間をポケットと誤認識している



主な特徴

- 酵素立体構造からポケットを自動で抽出し、基質結合サイトである可能性を出力
- 酵素の立体構造データを保有していない場合でも、“構造モデリング”サービスとの連携によりアミノ酸配列から構造を予測して、解析を実施
- “MolecularDynamics”サービスと合わせて使用することで、酵素-基質複合体の構造を可視化
- 基質化合物が不明である場合においても利用可能
- 予測したポケット内の化学的性質を解析可能

* Kandel et al., J Cheminform, 13:65, (2021)

株式会社digzyme

www.digzyme.com

〒105-0004 東京都港区新橋1-16-6 新橋柳屋ビル5F

【本製品サービスに関するお問合せ先】

お問い合わせフォーム

<https://www.digzyme.com/contact>

「解析サービスのお見積り・お問い合わせ」をご選択ください