

# digzymeによる酵素インフォマティクスサービス 酵素-基質ドッキング

“酵素-基質ドッキング”では、ご指定の酵素と基質がどのような複合体を形成しているかをドッキングにより解析します。酵素と基質の位置関係を統計的に解析することで、その基質が対象の酵素で反応するかを判断できます。

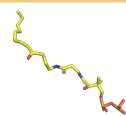
ポケット周辺残基と基質が構成可能な複数のポーズを複合体として出力

ご用意いただく情報

酵素の  
立体構造

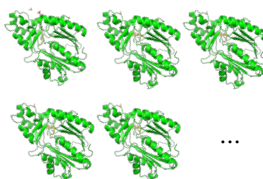


基質の  
立体構造

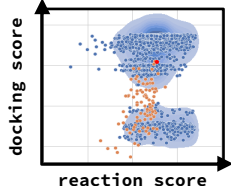


探索結果

複数の酵素-基質複合体

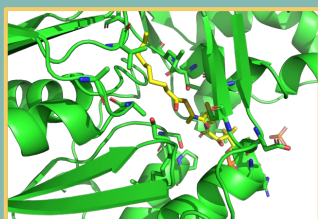


複数の複合体の統計



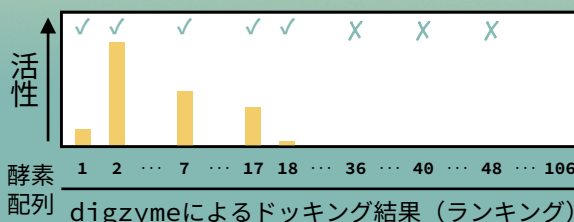
基質とポケット周辺残基の側鎖を動かし、可能な複合体ポーズを複数出力

複数のポーズでの活性残基や基質の位置、安定性などを可視化

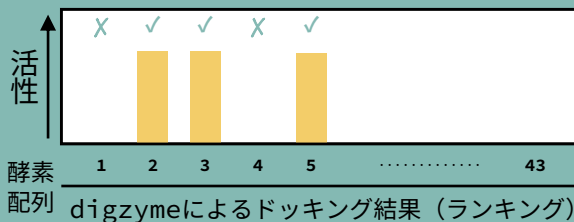


これまで複数のバイオ化プロジェクトで使用、基質への酵素の反応性を評価

事例1；メチル化反応 ( $R-H \rightarrow R-CH_3$ )  
ドッキング解析配列数：106  
→ 実験数：8 → 活性あり：5



事例2；水酸化反応 ( $R-H \rightarrow R-OH$ )  
ドッキング解析配列数：43  
→ 実験数：5 → 活性あり：3



## 主な特徴

- 酵素の活性残基と基質の位置関係を詳細に解析可能
- 酵素に対して、未知の基質を触媒する可能性も検討
- ポケットの中の任意の残基とリガンドの反応原子との位置関係も解析
- 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、ドッキング解析を実施
- 基質化合物の立体構造データは様々な形式に対応、データを保有していない場合でも、名称などから生成・変換可能