

digzymeによる酵素インフォマティクスサービス

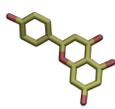
MolecularDynamics

“MolecularDynamics”では、ご指定の酵素-基質複合体の動きを 分子動力学法によりシミュレーションします。ポケットの中での基質のとりうる 配置や、基質結合によるタンパク質構造の変化を追跡します。

酵素-基質複合体の立体配置を物理シミュレーションで予測

ご用意いただく情報

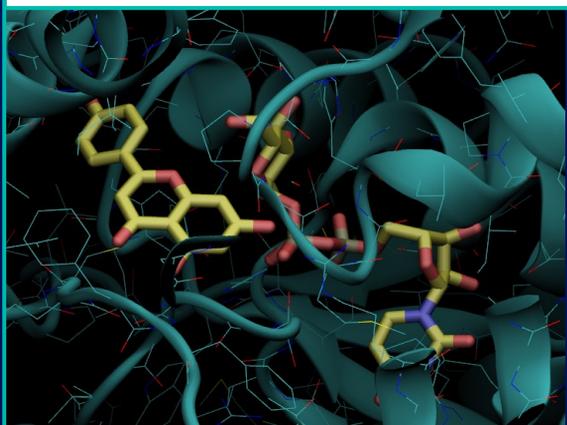
酵素の
立体構造



基質の
立体構造

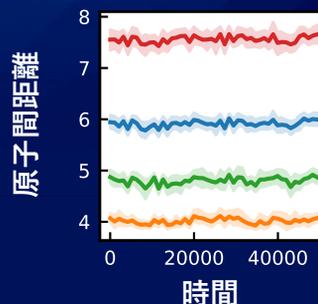
探索結果

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



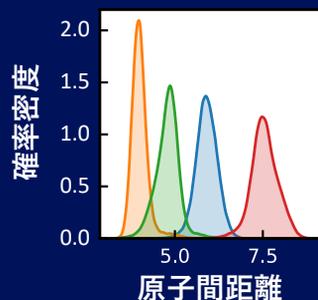
時系列データと分布の両方を予測・解析することが可能

実施例：糖転移酵素とその基質化合物
化合物とリン酸基の距離をモニタリング
→ 糖転移が起こる位置を推定



化合物の糖転移候補原子とリン酸基の間の距離をモニタリング

黄色の原子ペアが安定かつ距離が近い



左図は距離のデータを確率密度として表示

このデータを基に各ペアの安定度を自由エネルギーによって判定

主な特徴

- 酵素-基質アフィニティの指標を予測
- 既存の基質パラメータを、より高度な量子化学計算により高精度化可能
- 立体構造だけでは推定困難なタンパク質の運動を可視化
- 全原子分子動力学法による、原子レベルの詳細なシミュレーションが可能
- 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