

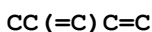
digzymeによる酵素インフォマティクスサービス
PolymerDynamics

“PolymerDynamics”では、ご指定の酵素とポリマー化合物の親和性を予測します。分子動力学法によって生成されたトラジェクトリから、相互作用 エネルギーの指標を算出し、反応性を評価します。

酵素-ポリマー複合体の構造を物理シミュレーションで予測

ご用意いただく情報

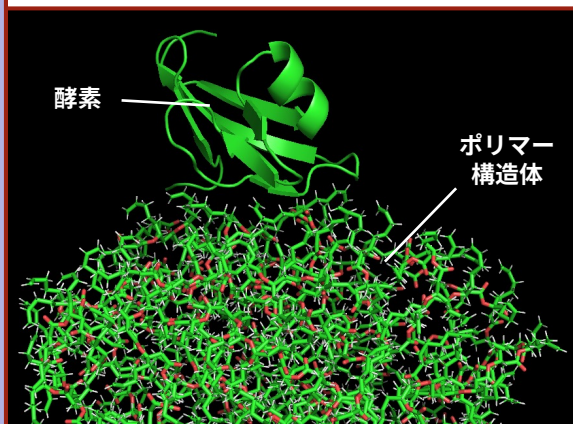
酵素の立体構造



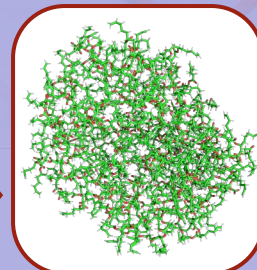
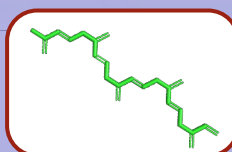
モノマーの化合物情報

探索結果

酵素の様々な配置を全原子分子動力学法により探索し、エネルギーに基づき最適な配置を決定



ポリマー化合物の立体構造は、モノマーの化学構造から自動で構築

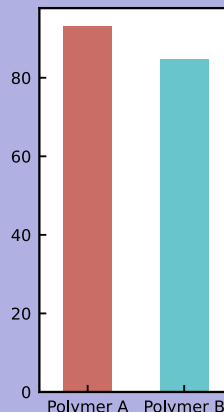


相互作用エネルギー予測によるポリマーのスクリーニング

実施例；
ポリマー分解酵素X

2種類のポリマー (A/B) に対して酵素活性を予測

→ Aのほうが分解されやすいことを示唆



■ 主な特徴

- 酵素-ポリマーの相互作用界面を可視化
- ポリマー化合物の立体構造は、モノマーの化学構造から自動で構築
- 親和性に寄与する酵素残基とポリマー原子を抽出、解析
- ポリマーのスクリーニングにも対応可能
- 全原子分子動力学法によって、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