

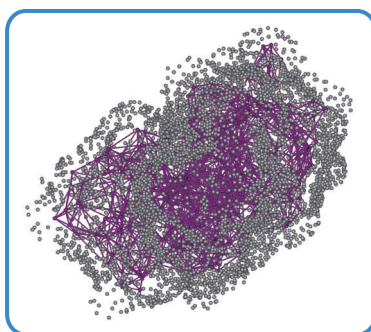
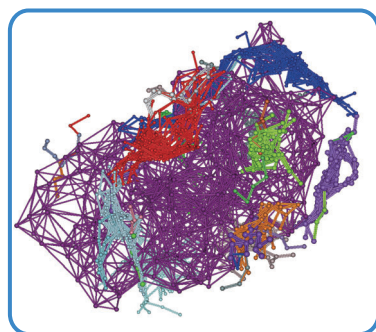
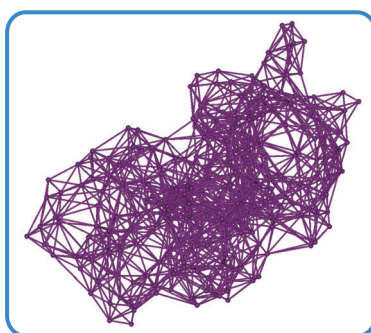
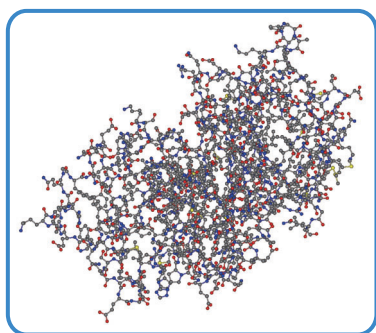
CONFLEX DOCK

タンパク質ペプチド・ドッキングシミュレーション

CONFLEX DOCK は、基質タンパク質にペプチド鎖が配位する位置を予測するドッキングシミュレーションプログラムです。
タンパク質とペプチドをアミノ酸残基ごとに粗視化し、4体ポテンシャルによりタンパク質-ペプチド間の親和性を評価します[1]。

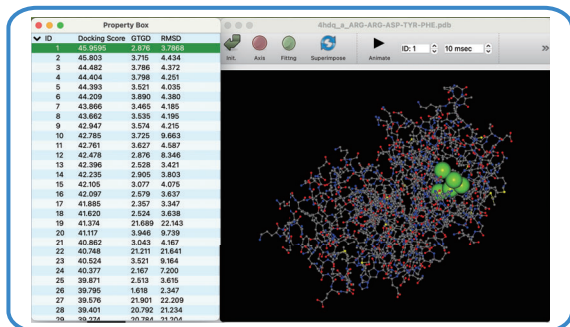
● 計算の概要

基質となるタンパク質を、アミノ酸残基のC α 原子を代表点として粗視化し、その表面に探索点を置きます。
探索点上に、ペプチドの配列にしたがってアミノ酸を配置して、4体ポテンシャルでスコアを評価します。

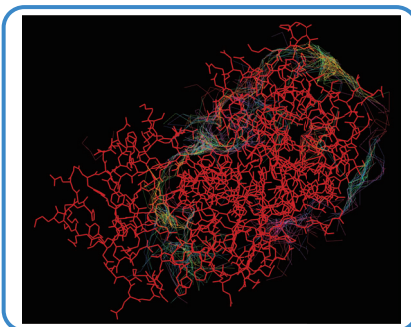


ペプチドは、三次元構造として指定(PDB ファイル)することもアミノ酸残基の配列のみで指定することも可能です。
三次元構造で指定した場合は、その構造と探索点との Geometric center To Geometric center Distance(GTGD) および Root Mean Square Deviation(RMSD)を求めます。

計算終了後、タンパク質構造とドッキングポーズをスコア順にリストして出力します。
また、得られたポーズを位置ごとにクラスタリングした構造データも出力されます。



ID	Docking Score	GTGD	RMSD
1	45.803	3.716	4.434
2	44.482	3.786	4.372
3	44.482	3.786	4.372
4	44.482	3.786	4.372
5	44.209	3.890	4.380
6	43.866	3.465	4.195
7	43.862	3.535	4.195
8	42.847	3.574	4.215
9	42.785	3.725	9.663
10	42.781	3.627	4.587
11	42.478	2.876	8.346
12	42.396	2.528	3.421
13	42.235	2.905	3.803
14	42.105	3.077	4.075
15	42.097	2.579	3.637
16	41.885	2.357	3.347
17	41.620	2.524	3.638
18	41.374	21.689	22.143
19	41.177	3.846	9.739
20	40.862	3.043	4.187
21	40.748	21.211	21.641
22	40.524	3.521	9.164
23	40.277	2.167	7.200
24	39.871	2.513	3.616
25	39.795	1.618	2.547
26	39.576	21.501	22.209
27	39.401	20.792	21.234
28	39.224	20.784	21.304



コンフレックス株式会社

〒108-0074

東京都港区高輪3-23-17

品川センタービルディング6F

TEL:03-6380-8290

FAX:03-6380-8299

Email:info@conflex.co.jp

<https://www.conflex.co.jp/>

● 動作環境

OS: Windows

macOS

Linux

※OSのバージョンは

弊社ホームページで公開

OpenGL: V3.3 以上

CPU: 1.0GHz以上

ディスク: 40GB以上

メモリー: 256MB以上



● 計算時のオプション

探索初期に残す点の数や、探索時の分岐数を増やすことで、ドッキングポーズをより広範囲に探索することができます。また、並列版を使用することで計算時間を短縮することも可能です。

[1] T. Yamamoto, Y. Ikabata, H. Goto, "Reconstruction of Four-Body Statistical Pseudopotential for Protein-Peptide Docking", *J. Comput. Chem., Jpn.-Int. Ed.*, **2024**, 10, 2023-0039.