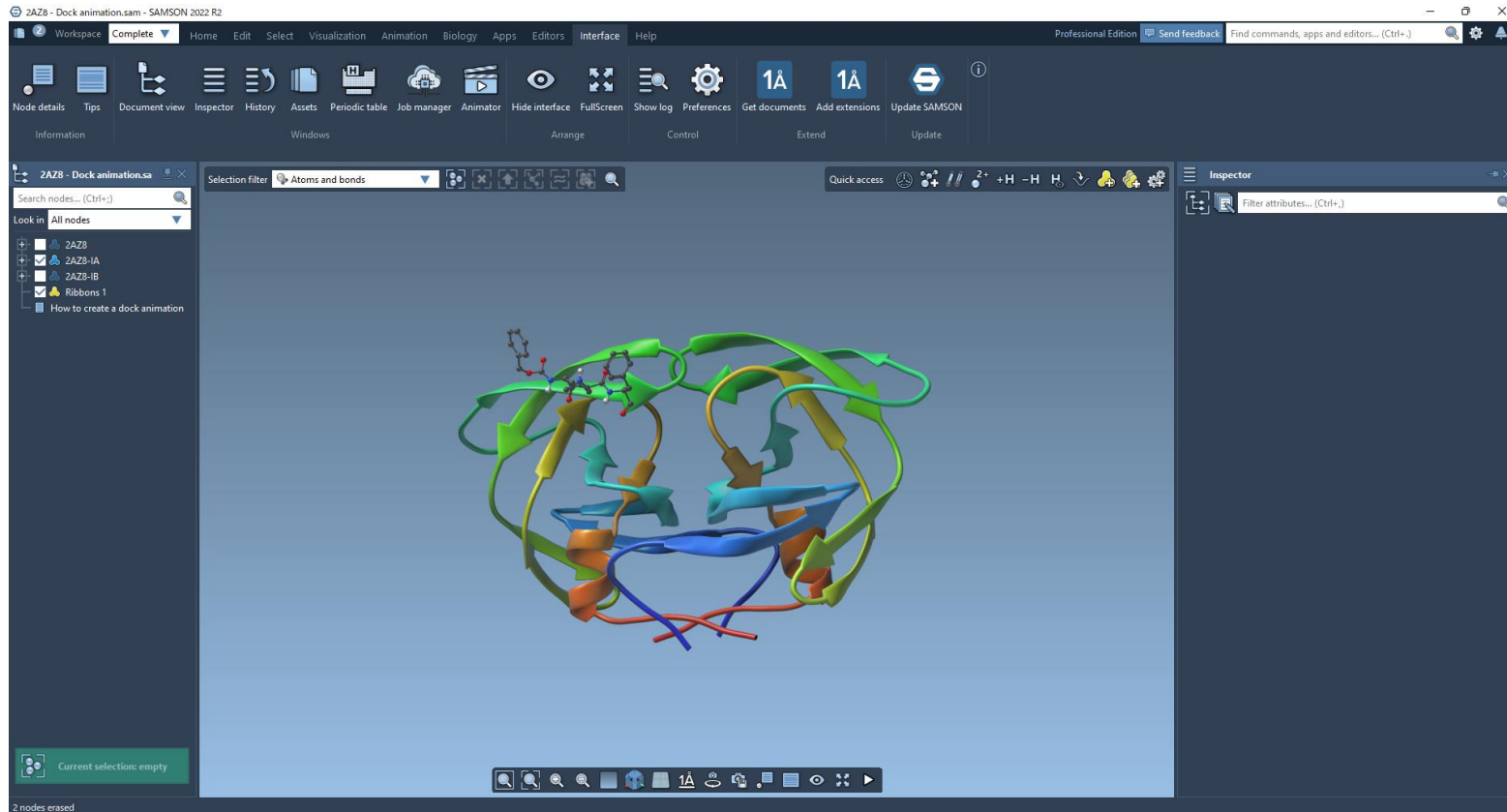
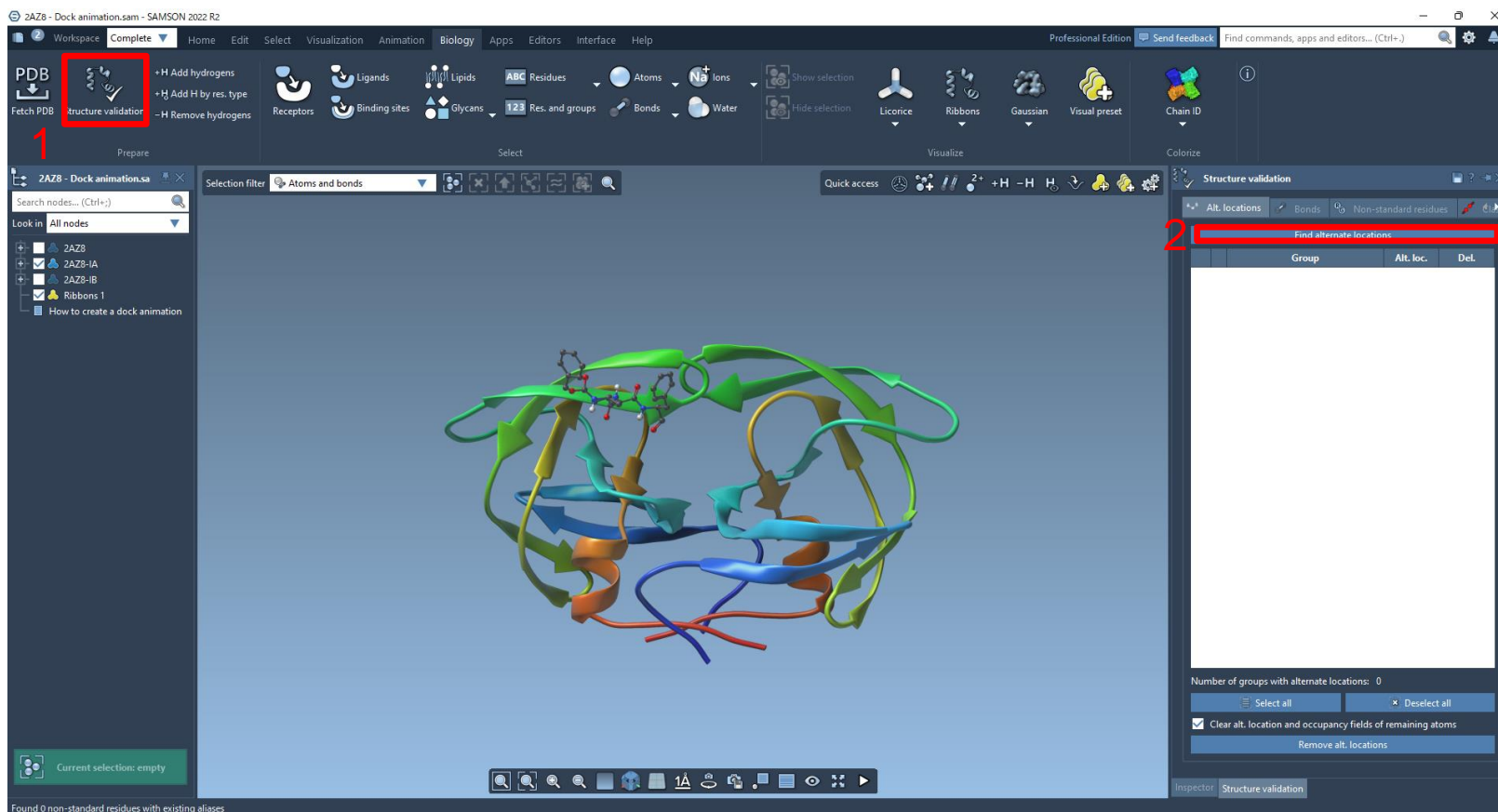


AutoDock Vina Extended によるリガンドドッキング

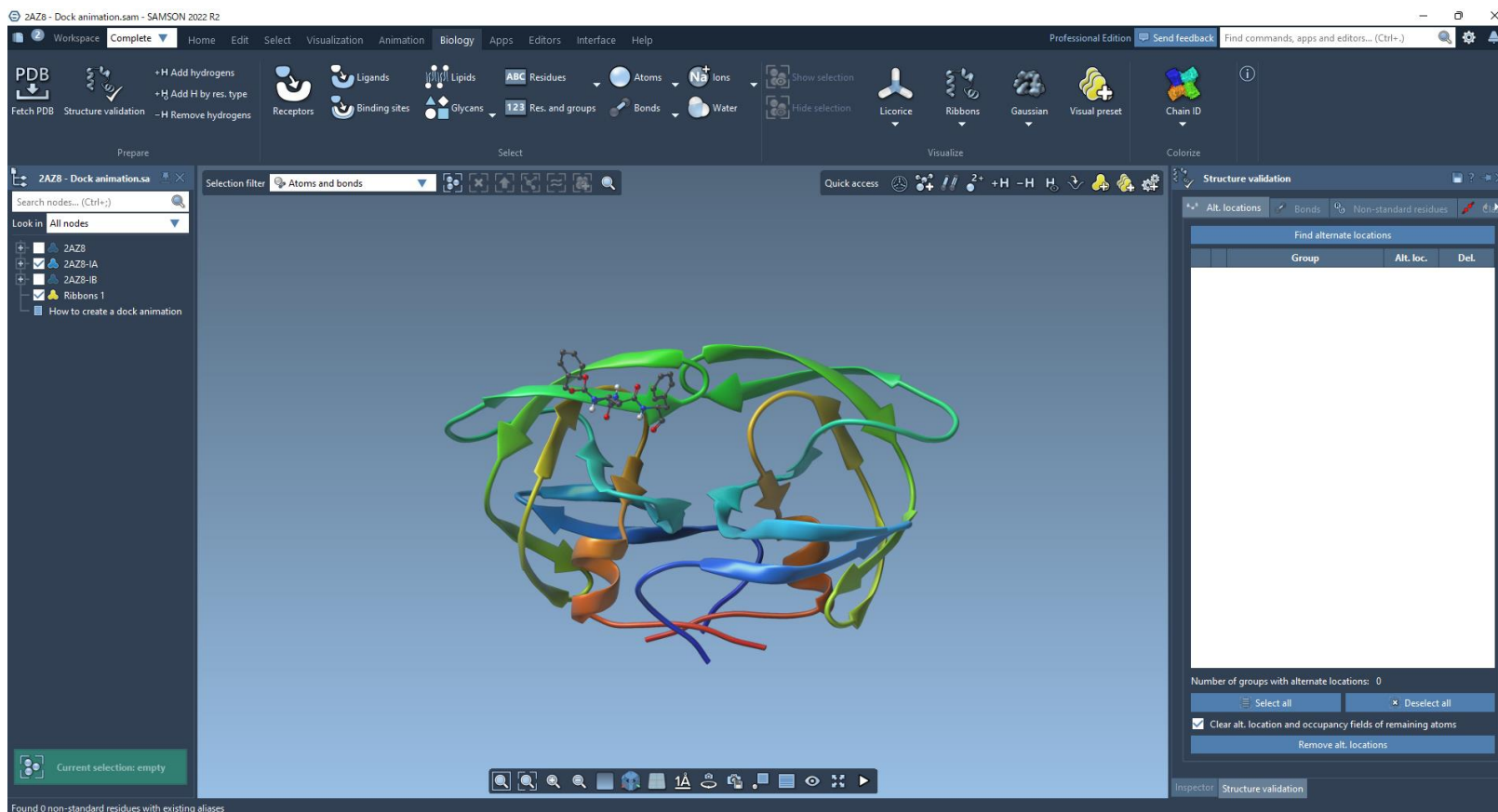
フィルジェン株式会社 バイオインフォマティクス部
(biosupport@filgen.jp)



ドッキングを行う受容体とリガンドの構造を表示した状態にします。
(受容体：HIV-1タンパク質分解酵素、リガンド：TL-3)

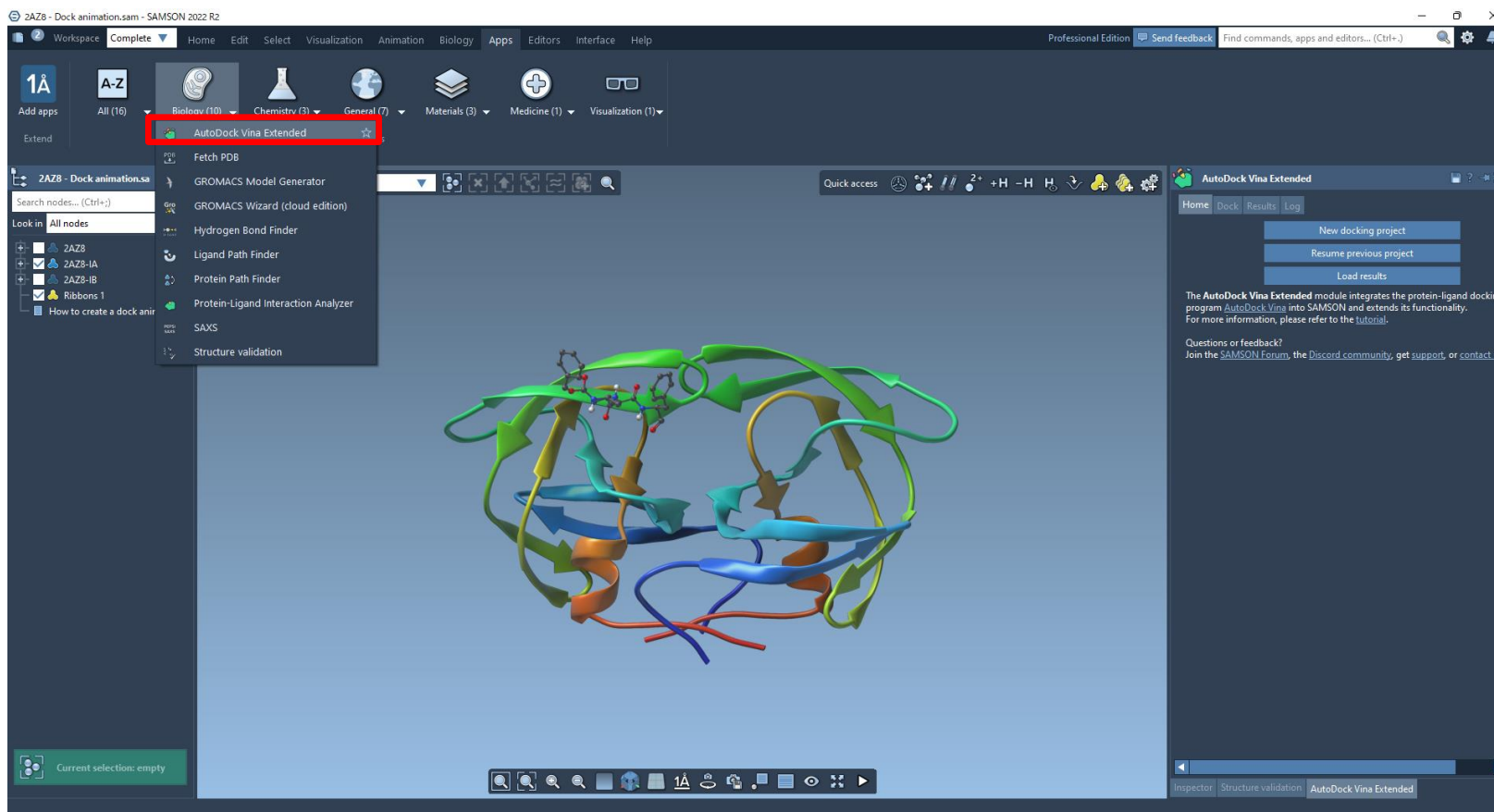


1. Biologyメニュー中の“Structure validation”をクリックし、Alt. locations タブを表示させます。
2. “Find alternate locations”をクリックし、シミュレーションを行う上で構造データに問題がないかを検証します。



同じく Biologyメニューから必要に応じて、水分子の除去、イオンの除去、水素原子の付加も可能です。

AutoDock Vina Extendedツールの選択



AppメニューのAutoDock Vina Extendedをクリックし、AutoDock Vina Extendedタブを表示させます。

The screenshot displays the SAMSON 2022 R2 software interface. On the left, a sidebar shows a list of nodes under 'Look in: All nodes'. The node '2AZ8' is highlighted with a red box and a red number '1'. The main 3D view shows a protein structure with a ligand docked. On the right, the 'AutoDock Vina Extended' panel is open. The '1 - Set receptor' section has the 'Set' button highlighted with a red box and a red number '2'. Below this, the '2 - Set ligand' section is visible. The '3 - Setup search domain' section shows a table of coordinates:

Center		Size	
X	Y	X	Y
0.0 Å	0.0 Å	57.2 Å	31.9 Å
z: 23.7 Å		z: 40.0 Å	

The '4 - Dock' section shows 'Exhaustiveness: 8' and 'Modes: 10'. The 'Save results' section has a file path 'C:/Users/IKENAGA-PC/Downloads' and an 'Open' button. At the bottom, there are 'Dock ligand', 'Pause', and 'Stop' buttons. The status bar at the bottom indicates 'Receptor has been set' and 'AutoDock Vina Extended'.

1. 受容体を選択します。（受容体ライブラリー指定することも可能です。）
2. AutoDock VinaタブのReceptorでSetをクリックします。

1

2

Inspector Structure validation AutoDock Vina Extended

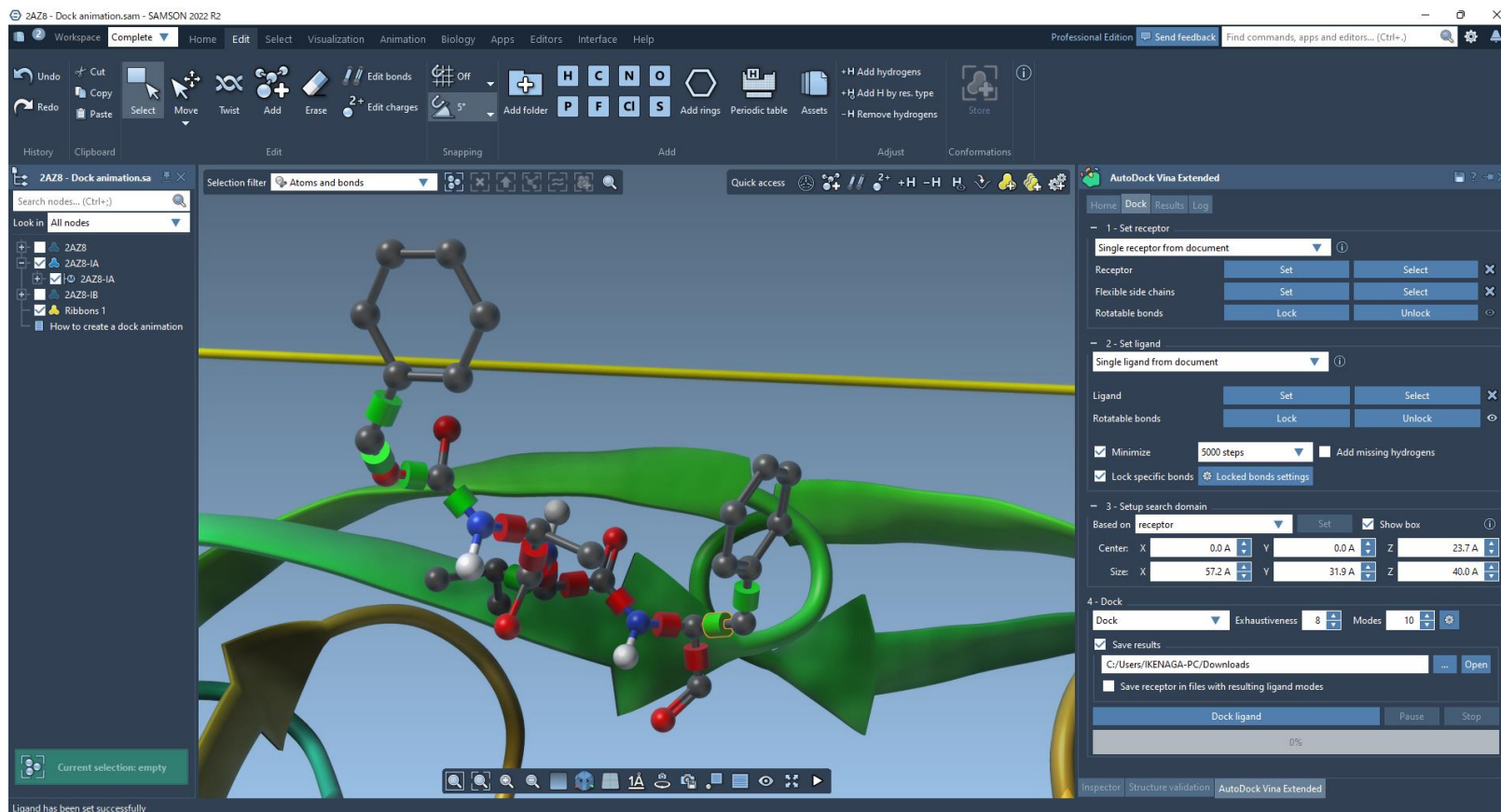
1. Flexible chainに指定する側鎖を選択します。
2. AutoDock Vina ExtendedタブのFlexible side chainでSetをクリックします。

リガンドの選択

The screenshot displays the SAMSON 2022 R2 software interface. The central 3D view shows a protein structure with a yellow bounding box. On the left, the 'Look in' panel shows a tree view with '2AZ8-IA' selected, indicated by a red box and the number '1'. On the right, the 'AutoDock Vina Extended' panel is open, showing the '2 - Set ligand' section with the 'Set' button highlighted by a red box and the number '2'. The '3 - Setup search domain' section shows a bounding box with X: 0.0 A, Y: 0.0 A, Z: 23.7 A and Size: X: 57.2 A, Y: 31.9 A, Z: 40.0 A. The '4 - Dock' section shows a progress bar at 0%.

1. リガンドを選択します。（リガンドライブラリー指定することも可能です。）
2. AutoDock Vina ExtendedタブのLigandでSetをクリックします。

結合の回転・無回転を指定



リガンドの各結合をクリックすることで、回転可能（緑）または回転不可能（赤）のいずれかを指定します。

（二重結合等、結合の特性に応じて一括で指定することも可能です。）

探索を行う領域を指定します。

AutoDock Vina ExtendedタブのSetup search domainまたは、黄色のボックスの頂点をドラッグすることで、サイズの変更が可能です。

The screenshot displays the SAMSON 2022 R2 software interface. The main window shows a protein structure (2AZ8 - Dock animation.sa) with a yellow bounding box around a specific region. A ligand is docked within this region. The left sidebar lists amino acid residues from ASP 30 to TYR 59. The right sidebar shows the 'AutoDock Vina Extended' settings, including options for setting the receptor, ligand, search domain, and docking parameters. The 'Dock ligand' button is highlighted with a red rectangle.

Dock ligandをクリックし、ドッキングを行います。

2AZ8 - Dock animation.sam - SAMSON 2022 R2

Workspace Complete Home Edit Select Visualization Animation Biology Apps Editors Interface Help

Professional Edition Send feedback Find commands, apps and editors... (Ctrl+.)

Undo Cut Copy Paste Select Move Twist Add Erase Edit bonds Edit charges Add folder Add rings Periodic table Assets +H Add hydrogens +H Add H by res. type -H Remove hydrogens Store

History Clipboard Edit Snapping Add Adjust Conformations

2AZ8 - Dock animation.sa Search nodes... (Ctrl+) Look in All nodes

Selection filter Atoms and bonds Quick access

2AZ8
2AZ8-IA
2AZ8-IA
2AZ8-IB
Ribbons 1
How to create a dock animation
AutoDock Vina Ext. - 2022-09-26
Configuration
2AZ8 - Flexible residues
2AZ8 - Flexible side chains
2AZ8-IA - Initial conformation
2AZ8-IA - Mode 1 (-8.6 kcal/m)
2AZ8-IA - Mode 2 (-8.5 kcal/m)
2AZ8-IA - Mode 3 (-8.2 kcal/m)
2AZ8-IA - Mode 4 (-7.9 kcal/m)
2AZ8-IA - Mode 5 (-7.6 kcal/m)
2AZ8-IA - Mode 6 (-7.3 kcal/m)
2AZ8-IA - Mode 7 (-7.1 kcal/m)
2AZ8-IA - Mode 8 (-6.9 kcal/m)
2AZ8-IA - Mode 9 (-6.9 kcal/m)
2AZ8-IA - Mode 10 (-6.8 kcal/m)

Current selection: 2AZ8-IA - Mo

AutoDock Vina Extended Home Dock Results Log

Filter results All results

Remove selected modes Remove hidden modes

mode	affinity (kcal/mol)	Ki (umol)	RMSD, lower bound (A)	RMSD, upper bound (A)
1	-8.57795	0.515605	0	0
2	-8.49476	0.593335	2.90623	4.48703
3	-8.18872	0.994545	2.21415	3.03261
4	-7.85444	1.74846	3.32792	6.1997
5	-7.63496	2.53244	2.82667	4.39614

Export table in CSV Tip: right-click on the table for additional functionality.

Plot Color palette: Qualitative: Default Show ligand names

Font... Save image Export as csv

Affinity, kcal/mol

Compounds

Inspector Structure validation AutoDock Vina Extended

Saved the selection to C:/Users/IKENAGA-PC/Downloads/2022-09-26_17h43m45s/results/2AZ8-IA/Initial conformation.mol2

計算結果一覧が表示されます。また、出力された各データをクリックすることで、それぞれのドッキングポーズを表示できます。

Protein-Ligand Interaction Analyzer

Setup | Surrounding residues | H-bonds

1 - Setup system

Receptor: Set Unset Select
Ligand: Set Unset Select

2 - Setup analysis

SASA probe radius: 0,14 Å
Surrounding residues cutoff radius: 5,00 Å

Hydrogen bonds between receptor and ligand

Cutoff distance: 3,50 Å | D-H...A angle ≥: 120°

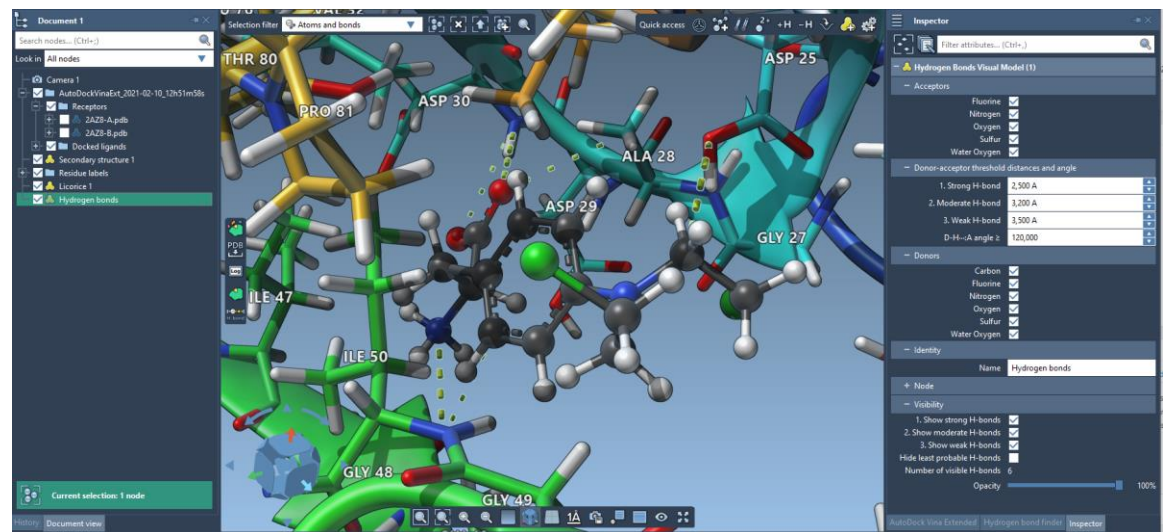
Donors: C N O F S
Acceptors: N O F S

3 - Analyze

Analyze: 100%

Asphericity	0,2045
H-bonds	6
Receptor's Rgyr (nm)	1,7483
System's Rgyr (nm)	1,7503
Receptor's SASA (nm ²)	229,675
Ligand's SASA (nm ²)	3,4573
System's SASA (nm ²)	231,638
Contact area (nm ²)	0,747

Export in csv



ドッキング結果を用いて、受容体-リガンド間の接触面積の算出や、水素結合を表示することなどが可能です。
また、有償アドオンにより、リガンド解離パスウェイの探索も可能です。

お問い合わせ先：フィルジエン株式会社

TEL: 052-624-4388 (9:00～18:00)

FAX: 052-624-4389

E-mail: biosupport@filgen.jp