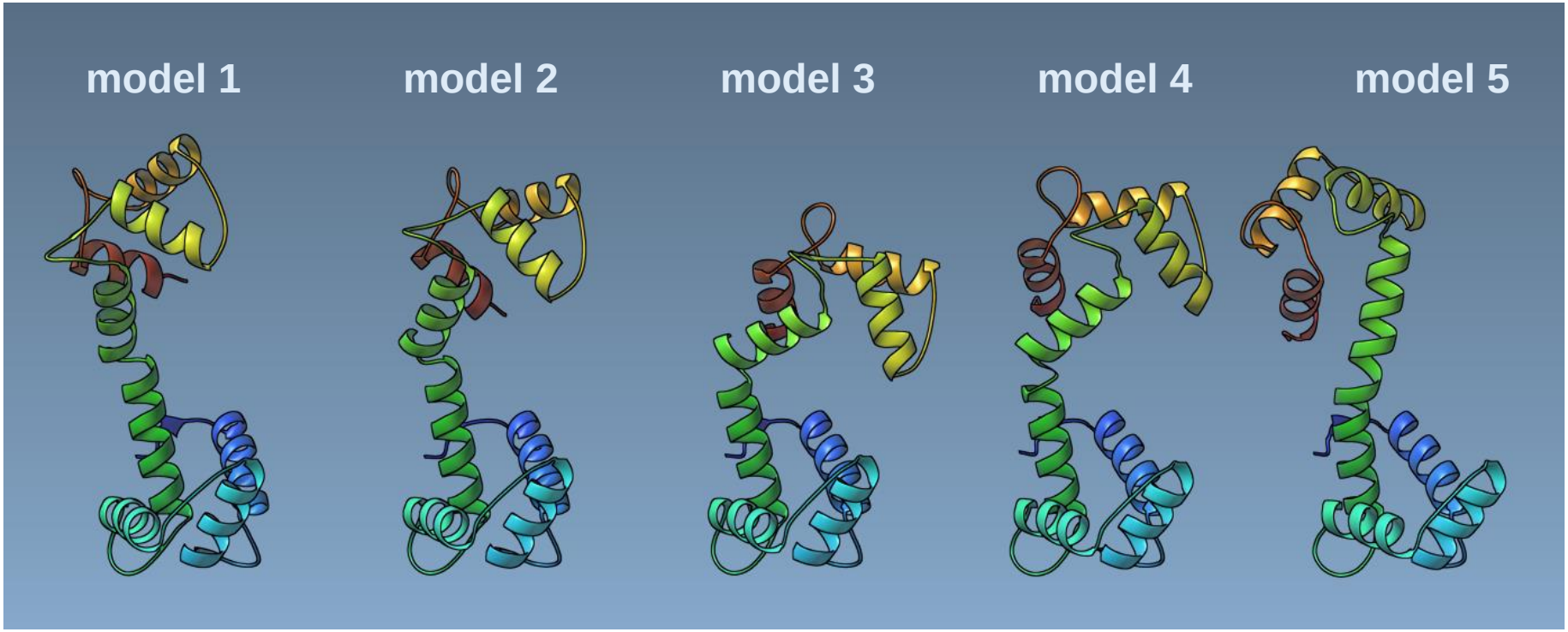
Pepsi-SAXSを使用したタンパク質予測構造の評価
（SAMSON connectを使用）

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)

2023.08

AlphaFoldによるタンパク質構造モデルの取得



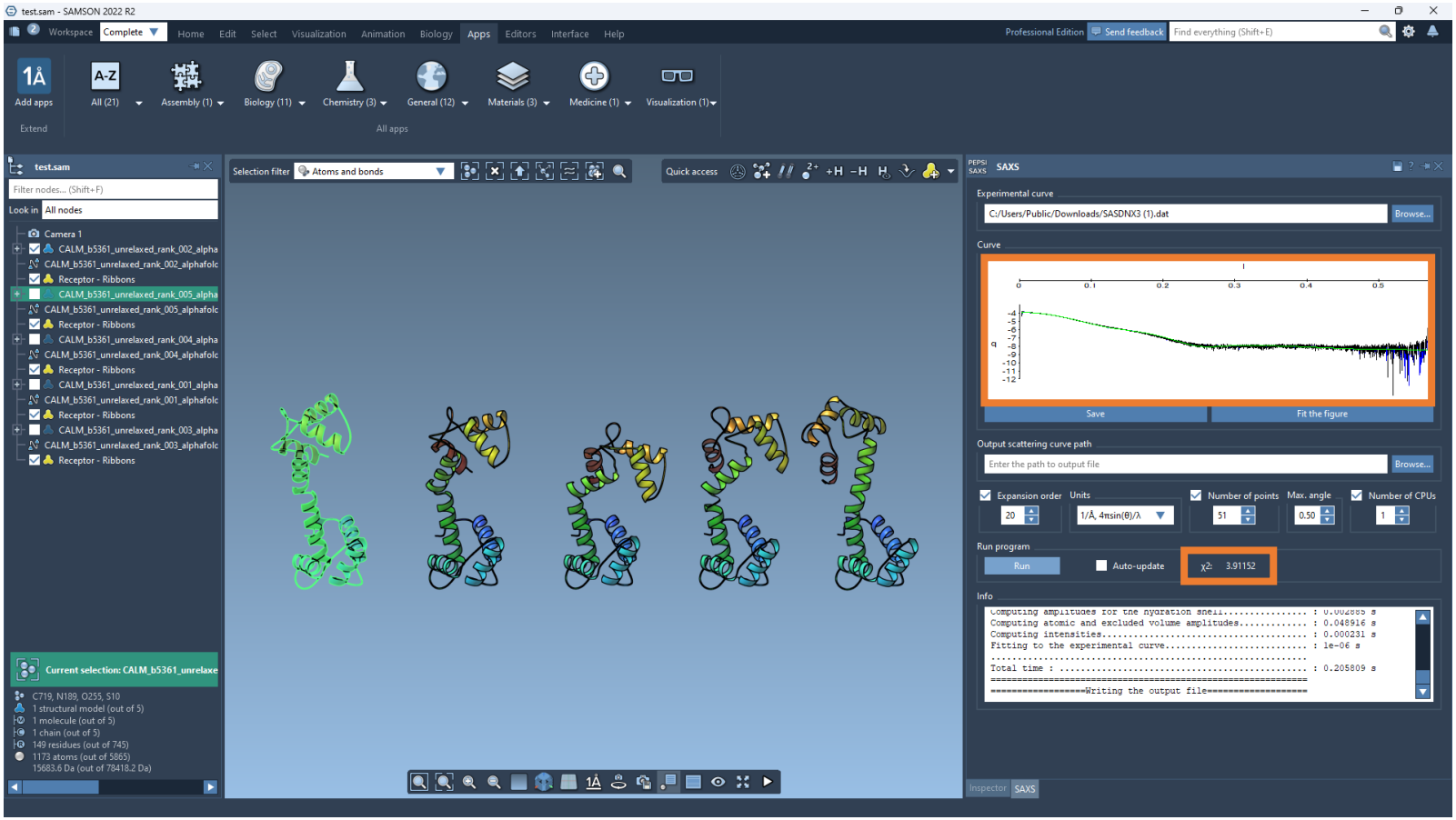
AlphaFoldにより、ヒトCalmodulin-1の構造について5つのモデルを得ました。

Pepsi-SAXSツールの起動

SASDNX3（SASBDB）

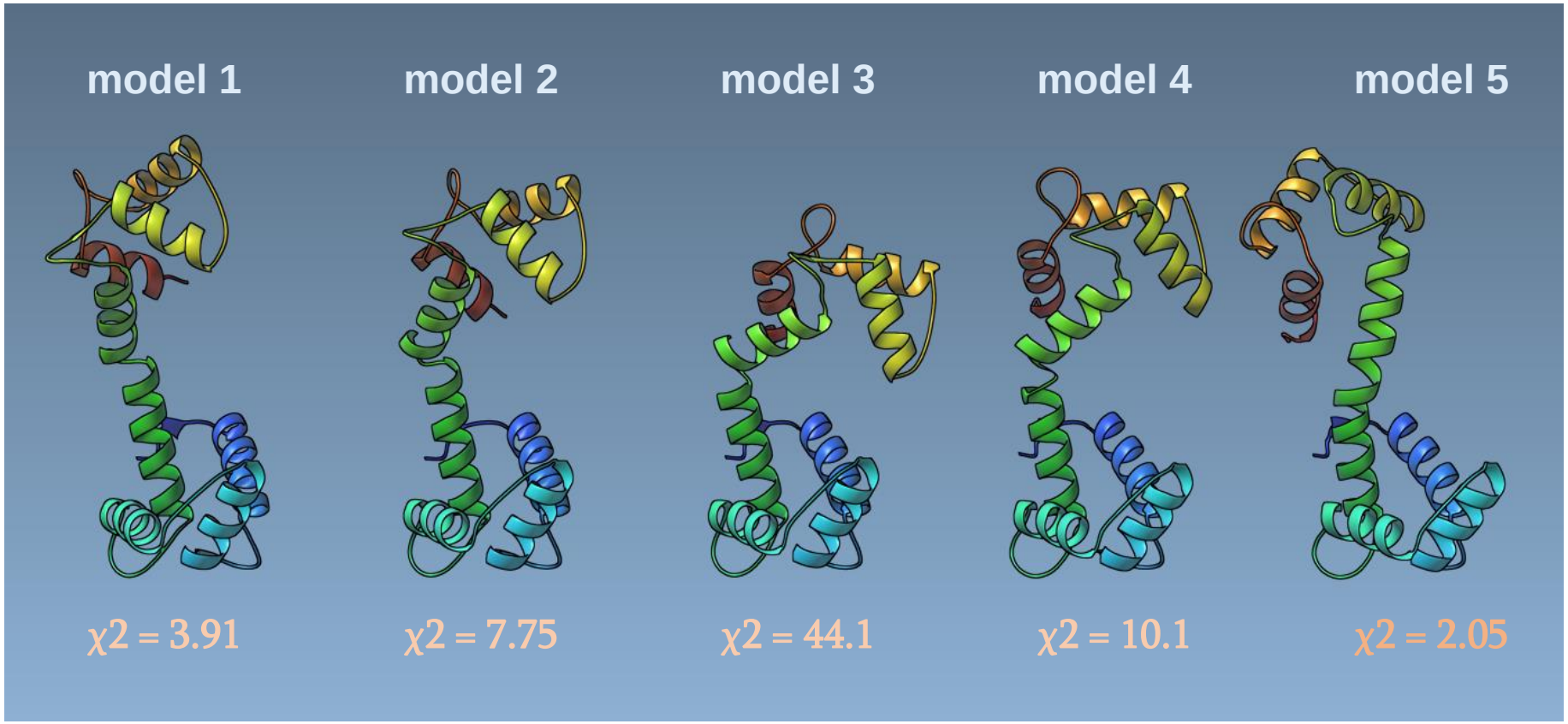
Pepsi-SAXSツールを起動し、
SAXS実験で得られた散乱曲線のデータを指定します。

各モデルから計算される曲線と実験曲線の比較



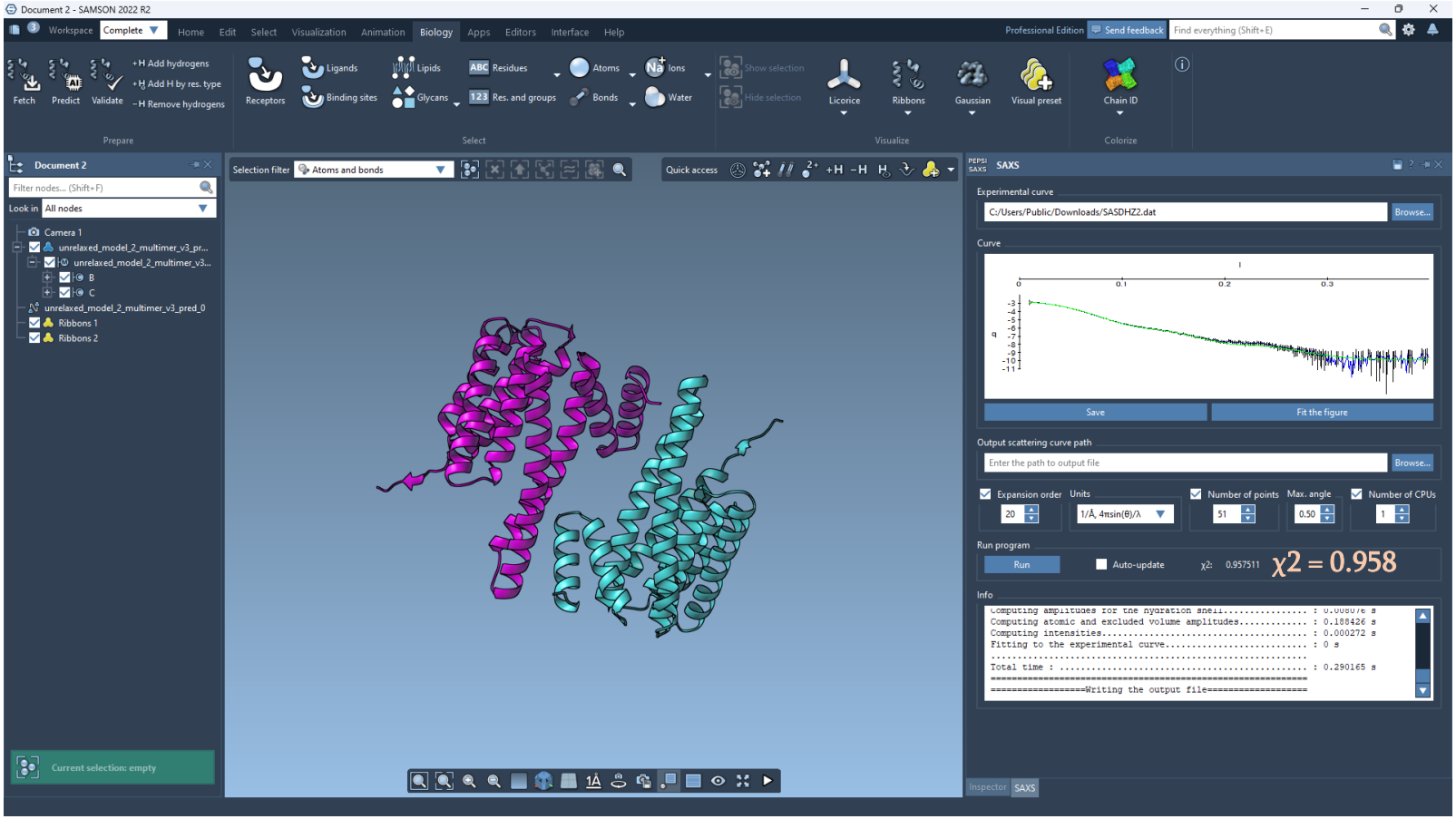
model 1を選択した状態で”Run”をクリックすると、
model 1の構造から計算した散乱曲線、
および実験で得た散乱曲線との一致度（χ^2）が表示されます。

予測構造の評価



他のモデルについても同様に計算を行うと、今回得られたモデルの中では、
model5が溶液中（2mM Ca^{2+}）での構造に近いことが分かります。

予測構造の評価



SASDHZ2（SASBDB）

また、AlphaFold-Multimerで予測した複合体構造の妥当性を、実験で得られた散乱曲線に基づいて評価することなども可能です。

SAMSON connectについて

・HP
https://filgen.jp/Product/BioScience21-software/OneAngstrom/index.html
・YouTube
https://www.youtube.com/watch?v=reRD38RTI6E
https://www.youtube.com/watch?v=GZzJy4cS7o4
https://www.youtube.com/watch?v=YG4JXf6v75o

お問い合わせ先：フィルジェン株式会社

TEL 052-624-4388 (9:00～17：00)

FAX　052-624-4389

E-mail: biosupport@filgen.jp