



NEW

立体構造情報不要で高速かつ高精度にスクリーニングができます！

人工知能を用いた *in silico* タンパク質-化合物間結合スクリーニングサービス

人工知能「LIGHTHOUSE」を用いてタンパク質、化合物間の結合性を網羅的に予測するサービスです。タンパク質・化合物の一次元構造のみを用いて、圧倒的に速い計算を可能にすると同時に既存の三次元構造を用いた解析と同等の精度も実現しています。

※本サービスは九州大学生体防御医学研究所 中山敬一教授の研究成果を基に、九州大学発ベンチャーの(株)Q イノベーションから提供されています。

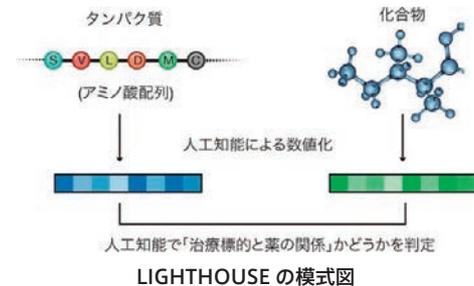
ここがすごい

創薬研究などにおいて、特定のタンパク質を標的とする薬剤候補の化合物を1つ1つ実験的にスクリーニングしていく作業は、多大な労力・コストを必要とし、開発コストの高騰の原因となっています。また、既知化合物すべてについてこのような作業を行うことは現実的ではなく、大きな課題となっていました。

コンピューターによる計算でのスクリーニング (*in silico* スクリーニング) は、この状況を打開する手法として期待されていますが、既存手法であるタンパク質の三次元構造を用いてのシミュレーションには多くの計算リソースと時間が必要な上、シミュレーションの前提となるタンパク質の立体構造はその多くが未知であり、シミュレーション自体ができないため、大規模なスクリーニング用途には実用的ではありませんでした。

今回、九州大学生体防御医学研究所の中山敬一教授の下で開発された人工知能「LIGHTHOUSE」は、タンパク質のアミノ酸配列と化合物の元素間の結合様式を人工知能を用いて数値ベクトル化し、タンパク質と化合物間の相互作用に関する大規模公開データベース STITCH、および BindingDB を教師データとして人工知能の訓練に用いることで開発されました。

タンパク質・化合物の一次元構造のみを用いて解析することで、圧倒的に速い計算を可能にすると同時に、大規模データベースを用いることにより既存の三次元構造を用いた解析と同等の精度も実現しています。LIGHTHOUSE を用いることで**無数に存在する化合物から有力な候補を効率的に絞り込んでから、実験的にスクリーニングすることが可能**になります。



特長

- どのようなタンパク質-化合物ペアであっても結合性を予測可能です。
- タンパク質の立体構造情報が不要 (一次構造のみで予測可能) です。

アプリケーション例
創薬スクリーニング, ドラッグリポジショニングなど

サービス内容

● 標的タンパク質に結合する化合物の探索

ご指定の**標的タンパク質**に対して結合する化合物を *in silico* スクリーニングする受託サービスです。

探索に用いる候補化合物群として下記の2つのオプションがあります。また、お客様が保有する化合物ライブラリを用いた解析にも対応いたします*。

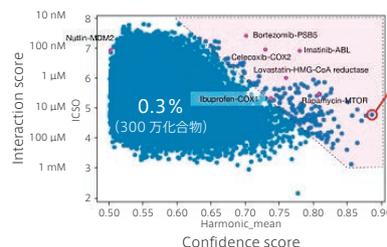
- 既存の承認薬：約1万種類
- ZINC データセットに登録済みの約10億種類の化合物

*化合物の SMILES 式をお客様からご提供いただく必要があります。

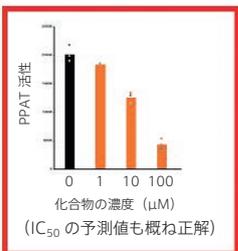
● 逆引き解析 (化合物→タンパク質)

お客様ご指定の**化合物**に結合するタンパク質をヒト由来タンパク質2万種からスクリーニングする受託サービスです。

解析実施例：PPAT 阻害物質の探索



この化合物について
PPAT 阻害活性を試験



がん悪性化にも関連がある代謝酵素 PPAT の阻害分子を探索するため、約10億化合物を LIGHTHOUSE でスクリーニングした

PPAT を抑制する化合物を LIGHTHOUSE によって予測し、既存薬 (左図のピンクの点) と同等以上のスコアを持つ化合物を候補として抽出した (左図のピンクのエリア)。そのトップヒットを実験的に検証したところ、確かに PPAT の抑制効果があることが実証された (右図)。

ご注文方法/価格

詳細は、当社受託・特注品担当までお問い合わせ下さい。

[メーカー：QIN]