

# 人工知能「LIGHTHOUSE」を用いた *in silico* スクリーニング



株式会社 Q イノベーション

※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もとに、九州大学発ベンチャーの株式会社 Q イノベーションから提供されています。

Web ページ番号

67448



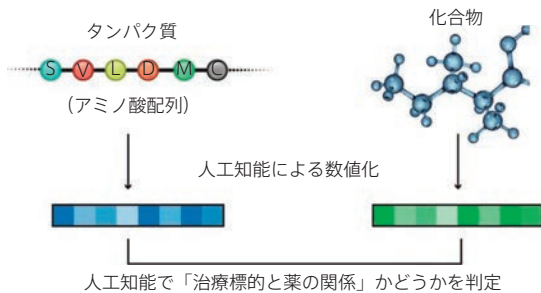
## AI でタンパク質と化合物の結合性を予測します

タンパク質，化合物の一次元構造のみを用いて解析

- 立体構造情報は不要
- 圧倒的に速い計算（ドッキングシミュレーションの 2,000 倍以上）
- 既存の三次元構造を用いた解析と同等の精度

ここがすごい

- 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
- タンパク質の立体構造情報は不要（一次構造のみで予測可能）
- 化合物から結合タンパク質を探索することも可能



### ■アプリケーション

- 創薬スクリーニング
- ドラッグリポジショニング
- 既知化合物の合成展開による改良検討
- タンパク質中のアミノ酸変異が、標的化合物との相互作用に及ぼす影響の予測

### 順引き解析（標的タンパク質→化合物）

- ✓ 既存の承認薬 約 1 万種
- ✓ ZINC データセット 約 10 億種
- ✓ お客様保有の化合物ライブラリー

### 逆引き解析（指定化合物→タンパク質）

- ✓ ヒト由来タンパク質 約 2 万種

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。

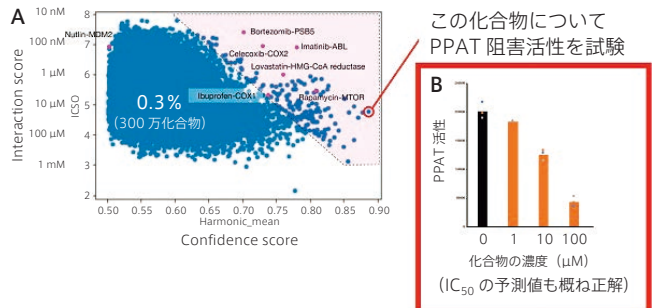
### ■文献

COVID-19 治療に有望な化合物の発見に成功  
“LIGHTHOUSE illuminates therapeutics for a variety of diseases including COVID-19”  
Shimizu, H. et al., *iScience*, **25** (11), 105314 (2022). [PMID : 36246574]

### 解析実施例

#### がんの悪化に関わる酵素 PPAT の阻害物質の探索

PPAT をノックダウンすると様々ながんの進行を食い止められることが知られているが、PPAT の立体構造は未だ解明されておらず、PPAT の阻害物質も知られていなかった。ZINC データセットに登録されている 10 億近い化合物を LIGHTHOUSE で探索し、発見した最も有望な化合物を調べることで、世界で初めて PPAT 阻害物質の発見に成功した。



既存薬（図 A：ピンク色の●）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（図 A：網掛け）。そのトップヒットを実験的に検証したところ、確かに PPAT の抑制効果を実証された（図 B）。

まずはお気軽にご相談下さい！

価格，納期をご案内いたします。  
Web 面談でのご説明も可能です。

✉ [jutaku@funakoshi.co.jp](mailto:jutaku@funakoshi.co.jp)



販売店

funakoshi



フナコシ株式会社 〒113-0033 東京都文京区本郷2丁目9番7号  
www.funakoshi.co.jp ✉ [info@funakoshi.co.jp](mailto:info@funakoshi.co.jp)

試薬：✉ [reagent@funakoshi.co.jp](mailto:reagent@funakoshi.co.jp) TEL 03-5684-1620

機器：✉ [kiki@funakoshi.co.jp](mailto:kiki@funakoshi.co.jp) TEL 03-5684-1619

受託：✉ [jutaku@funakoshi.co.jp](mailto:jutaku@funakoshi.co.jp) TEL 03-5684-1645

※本紙に記載されている価格は、2023年6月15日現在です。

FUN-7589 (2023.6, No.771)