

AIを用いたIN-SILICO創薬スクリーニング受託解析の利用について

1. 概要

AIによるIn-silico創薬スクリーニングソフトウェア「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解析するため、計算にかかる時間が既存の三次元構造を用いた解析に比べ大幅に抑えることができます。精度についても条件によっては既存のものと同程度を実現しています。

*Shimizu H, et al. LIGHTHOUSE illuminates therapeutics for a variety of diseases including COVID-19. iScience. 2022 Oct 10;25(11):105314. doi: 10.1016/j.isci.2022.105314.

2. 特徴

- どのようなタンパク質または化合物ペアであっても結合性を予測
- タンパク質の一次構造のみ(立体構造情報が不要)で予測
- 既存のFDA承認薬、約10,000種類**の化合物からの探索
- PubChem に登録されている約100,000,000種類の化合物からの探索
- 依頼者の保有する化合物ライブラリからの探索
- タンパク質から結合化合物だけでなく、化合物から結合タンパク質を逆引き探索も可能

**準備中(現在は約4,000種類)

3. 利用手順

3.1 打ち合わせ

受託の依頼はメールにてあらかじめご連絡ください。折り返し打ち合わせの日時調整のご連絡を致します。

担当:

吉本 (junichiro.yoshimoto@fujita-hu.ac.jp)

観音 (takayuki.kannon@fujita-hu.ac.jp)

3.2 受託解析依頼書提出

オープンファシリティセンターのホームページから「AIを用いたIn-silico創薬スクリーニング受託解析依頼書」をダウンロードし、必要事項を記入してください。詳しくは打ち合わせ時にご相談ください。

URL: <https://www.fujita-hu.ac.jp/~openfacility/jyutaku/index.html>

3.3 解析に必要なデータの提出

タンパク質や化合物の情報を提出いただきます。メールまたはデータサイズが大きい場合は保存デバイスでの持ち込みも可能です。詳しくは打ち合わせ時にご相談ください。

3.4 結果報告

報告書と解析結果をメールでお送りします。他の形式での報告を希望する場合は打ち合わせ時にご相談ください。

4. 受託解析の利用料金と支払い方法

4.1 受託解析料金

探索タンパク質または化合物が1,000,000種類以下 3,300円 (学内)

探索タンパク質または化合物が1,000,000種類以上 要相談

4.2 支払い方法

受託が終了した翌月上旬ごろに、研究支援部研究支援課から請求書が届きます。本学研究費や公的研究費などでの支払いが可能です。詳しくは研究支援課へお問い合わせください。

5. 免責事項

本受託サービスは結果を保証するものではありません。当室の過失である場合を除き、結果が得られない場合の責任は一切負いかねます。この場合でも受託料は請求いたします。