連携・融合ユニット

補助事業代表者（所属・職名）
小島 宏建（東京大学大学院薬学系研究科・特任教授）

企業ノウハウとアカデミア支援経験に基づく創薬リード創製支援

補助事業分担者（所属・職名）
安田 公助（東京大学大学院薬学系研究科・特任准教授）、石原 司（産業技術総合研究所バイオメディカル研究部門・主任研究員）、岡野 健太郎（神戸大学大学院工学研究科・教授）、青木 伸（東京理科大学薬学部・教授）、馬場 良泰（徳島大学研究支援・産学官連携センター・教授）、西脇 永敏（高知工科大学理工学群・教授）

概要

創薬アイデアを提案する支援希望者に対し、目的とする低分子・中分子化合物の最適な探索方法を希望者と共に製薬企業のノウハウを活用しながら決定し、大学の研究室や製薬企業、AMED DISC由来のサンプルを含む約38万の化合物ライブラリーサンプルから探索する支援を行ってきている。希望者には実験室にてアッセイ系構築支援を個別に行うなど伴走支援型の手厚い支援を実施している。得られた有望なヒット化合物から、強力な生物活性と高い選択性、優れたADME特性を有し、知的財産権確立の見込めるリード化合物の創出を目指す方には、構造展開ユニットの安田グループに引き継ぎ、密接に協力して支援してきている。

支援の内容

- マイクロプレートに μL または nL 単位で微量分注した38万のライブラリーからの化合物サンプルの提供
- スクリーニングに用いる試験方法確立の伴走支援
- スクリーニングに用いる装置・施設提供
- スクリーニング実施と陽性化合物の選定支援
- 技術講習会と実地支援によるスクリーニング技術普及

支援は、インシリコ解析ユニット等と支援が効率化するように連携して実施

創薬総合支援事業（創薬ブースター）とは、スクリーニング成果をもとに被支援者が応募したり、採択課題を支援したり、AMED 産学協働スクリーニングコンソーシアムの化合物を受け入れたり、相互に連携

支援の成果

- 支援課題数：411（支援中168　支援完了243）
  複数課題支援グループ：71（内5課題以上　10）
  コンサルティング課題数：274
  提供サンプル数：797万
- スクリーニング講習会受講者数：524
- 論文報数（支援者含む）：70
- 特許出願のための化合物情報公表申請件数：15
- 企業導出につながった陽性化合物発見件数：2

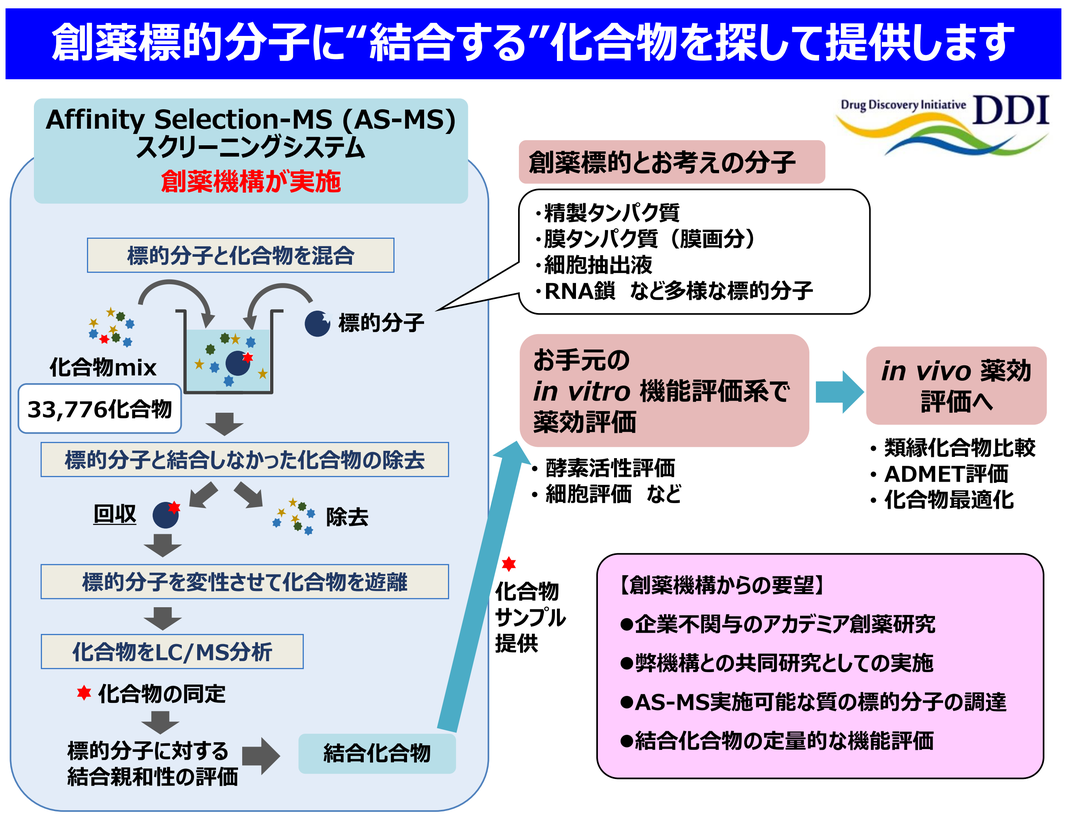
支援実績はウェブサイトにも多数掲載
www.ddi.f.u-tokyo.ac.jp/screening_results/

高度化における研究背景・目的

質量分析（MS）に基づく化合物の評価手法の良さは、物質量をラベルフリーで高感度測定できることである。従来は測定に時間を要していたため、High-throughput screening（HTS）での利用は難しかったが、装置の感度向上と高速化がなされてきた結果、国内外の製薬企業ではHTS利用が進んでいる。しかし、MS装置は高価で、国内のアカデミアではHTS利用の例がほとんどない。
私どもは、反応液の分離精製クロマトグラフィーを要しないEchoMS装置を用いたHTSの技術基盤を整備することで、実施が難しかった標的に対してもHTS可能になると考えた。また、導入したMS装置をさらに活用した標的分子の結合化合物を見出すことができるAffinity Selection-MS（AS-MS）によるHTS基盤の構築を目指してきた。

高度化の成果

- EchoMSにて2件のスクリーニング支援完了
- AS-MSによるHTS基盤を構築し、支援に実装完了



今後の発展

創薬アイデアを実用化するための第一歩となる化合物を見出す研究基盤として、化合物ライブラリーのさらなる構成改善と適切な管理と運用を継続するとともに、スクリーニングに用いる共用装置の維持に努める。その上で、質量分析に基づくスクリーニング基盤の強化を図り、化合物探索が難しかった案件にも支援を積極的に広げたい。

開示すべきCOIはありません