

生命科学・創薬研究のシームレスな支援に向けた AMED-BINDS の取り組み Initiatives of AMED-BINDS for Seamless Support of Life Science and Drug Discovery

開催趣旨:

「生命科学・創薬研究支援基盤事業 (BINDS)」は、我が国の幅広い生命科学関連研究に立脚し、その中の優れた研究成果を創薬研究などの実用化研究開発に繋げることを目的として本年 4 月に開始した事業である。構造解析に係る大型機器では、クライオ電子顕微鏡、放射光施設、中性子線構造解析施設等を備え、化合物ライブラリーについては、製薬企業拠出ライブラリー、ドラッグ・リポジショニングに資する既存薬ライブラリー、中分子創薬ライブラリー、天然物ライブラリーなど特徴あるライブラリーを整備している。創薬研究の臨床への外挿性に資する疾患モデル細胞・動物の提供、生体模倣評価系 (スフェロイド、オルガノイド等) の整備、さらに、新規モダリティ探索に資する核酸・ペプチド合成、創薬標的核酸の構造解析、AI 技術を活用したインシリコスクリーニング、生命現象を追究するオミックス解析、バイオインフォマティクスなど、最先端の生命科学・創薬研究を推進するための高度な研究支援を行っている。

このシンポジウムでは、BINDS の数々の研究領域のシームレスな支援に焦点を絞って 3 名の先生方にご講演をいただき、AMED-BINDS の取り組みと今後 5 年間の展望について議論する場としたい。

モデレーター: 善光 龍哉 Tatsuya ZENKOH
国立研究開発法人 日本医療研究開発機構
Japan Agency for Medical Research and Development (AMED)

1. 東京大学の創薬リード創製支援

小島 宏建 Hirotatsu KOJIMA

東京大学大学院薬学系研究科附属創薬機構

Drug Discovery Initiative, Graduate School of Pharmaceutical Sciences, The University of Tokyo

創薬機構は、市販低分子化合物を主として、大学独自の合成化合物や製薬企業の寄託化合物、AMED DISC のタンパク質相互作用阻害中分子ライブラリーを受け入れ、約 34 万サンプルからなる化合物ライブラリーを管理・運用している。その化合物ライブラリーやサンプル溶液の超微量分注装置、各種スクリーニング機器、経験豊かなスタッフを基盤として、機構創設以来、ライフサイエンス研究での新しい知見やアイデアをもとに、医薬や農薬、化粧品、研究ツールに繋がる有用な化合物の創出を目指す約 800 の研究テーマを支援してきた。近年は導入した Echo MS® システムを用いた SARS-CoV-2 Main Protease 阻害剤探索を報告するなど、質量分析に基づく HTS アッセイ系構築にも力を入れている。

見出されたスクリーニングヒット化合物からの展開合成支援を機構内の構造展開ユニットが担当しており、ADME 指標も考慮した実用化支援研究を実施している。

本シンポジウムでは、これまでの経緯や成果の例、現状と今後についてお話ししたい。

なお、化合物サンプルの利用方法や化合物スクリーニング研究支援の最新情報は弊機構のウェブサイト (www.ddi.u-tokyo.ac.jp) をご覧ください。

2. 創薬サイエンス研究支援拠点におけるシームレスな BINDS 創薬研究支援

辻川 和丈 Kazutake TSUJIKAWA

大阪大学大学院薬学研究科/薬学部

Graduate School/School Pharmaceutical Sciences, Osaka University

大阪大学薬学研究科創薬サイエンス研究支援拠点は、生命科学・創薬研究支援基盤事業

(BINDS) のユニット連携・ユニット融合においてアカデミアの創薬研究をシームレスに支援する体制を構築している。創薬標的分子の探索では、整備された最新の質量分析計によるメタボロミクスやリポドミクスの解析支援を行っている。また、がん臨床検体由来細胞を利用した解析も可能である。発見された標的分子に対するハイスループットスクリーニング

(HTS)系の構築は、元大手製薬企業出身のHTS担当者により支援される。当拠点ではAll Japanで低分子化合物を整備するJ-PUBLICのライブラリーを含めた多様な化合物ライブラリーをHTS用に保有している。ヒット化合物が取得できると、製薬企業出身・出向のメディシナルケミストによる誘導体合成展開や初期ADMET・物性評価の支援も受けられる。また創薬研究における種々の相談も受け付けている。これら創薬支援は、どの段階からでも利用できる。本シンポジウムではアカデミアにおける創薬研究を加速し、革新的イノベーションを創出させる創薬サイエンス研究支援拠点のこれらBINDS支援体制を紹介する。

3. 1細胞/微小組織マルチオミックスのオールインワン解析による生命科学研究支援

由良 敬 Kei Yura

早稲田大学理工学術院・先進理工学部

School of Advanced Science and Engineering, Faculty of Science and Engineering,

WASEDA University

1細胞や微小組織から分子データを抽出することができれば、組織の内部で何が起きているかを詳細に調べることができる。しかしそのような解析には、高度な測定技術とデータ解析技術が必要である。そこで我々は、測定技術をもつグループと情報解析ができるグループをたばねた連携・融合ユニットを構成し、1細胞/微小組織からDNA/RNA解析、プロテオーム解析、メタボローム解析、およびバイオインフォマティクス解析のオールインワン解析を実施できる体制を構築した。代表機関の早稲田大学には、1細胞RNA解析とともに、独自の微小組織採取装置を活用して空間的位置情報を担保した微小組織DNA/RNA-seqライブラリー調製法がある。分担機関の九州大学には、各種クロマトグラフィおよび質量分析技術に立脚した高感度メタボロームおよびプロテオーム解析システムがある。電子データの解析は、代表機関の早稲田大学と分担機関の東京大学で実施し、ノンコーディングRNAを含むRNA情報、発現タンパク質、タンパク質と相互作用するメタボライトの情報など有益な情報を文献情報からも抽出する。連携・融合ユニットでは、初期段階からウェットとドライが融合して研究支援を実施する。

2022年度AMED関連イベントのお知らせ

シ …シンポジウム 講 …講習会
W …ワークショップ セ …セミナー
公 …公開講座 他 …その他

会期	カテゴリ・イベント名	会場
6月 終了木	W 第22回 日本蛋白質科学会年会	オンライン つくば国際会議場
6月 終了金	W 第15回 日本エピジェネティクス研究会年会	オンライン 九州大学医学部百年講堂
8/24 水	シ BINDSシンポジウム	オンライン 一橋講堂(東京都)
9/22 木	公 BINDS公開講座(第1回)	オンライン
10/1 土	講 BINDS発現機能解析インシリコ融合ユニット講習会	オンライン 早稲田大学 西早稲田キャンパス63号館
10/14 金	セ BINDSセミナー(北海道大学)	オンライン
10/25 火	W CBI学会2022年大会	タワーホール船堀
11/4 金	講 BINDSユニット連携講習会(東京大学)	オンライン
11/18 金	セ BINDSセミナー(東北大学)	オンライン
12/1 木 または 2金 <small>講演予定 ※講演日は決まり次第HP上でお知らせいたします。</small>	W 第96回日本薬理学会年会 第43回日本臨床薬理学会学術総会	オンライン パシフィコ横浜
3/25 土 ~ 28 火 <small>講演予定 ※講演日は決まり次第HP上でお知らせいたします。</small>	W 日本薬学会第143年会	北海道大学(札幌)