

第16回スクリーニング学研究会 企業セミナーHP 掲載原稿

Axcelead Drug Discovery Partners

AIを活用した“Lab-in-the-Loop”リード創出プラットフォームと事例紹介

Axcelead Drug Discovery Partners は標的探索から IND まで、製薬企業で長年培った豊富な技術や知識、経験を基にワンストップの創薬研究サービスを提供する創薬ソリューションプロバイダーです。製薬企業由来の独自ライブラリーを用いたハイスループットスクリーニングによる高品質なヒット創出や、AI、合成化学などの機能をフル活用したリード創出など、スクリーニング関連のソリューションも取り揃えています。

本セミナーでは、高い成功確率をほこる Axcelead のヒット同定プラットフォームの概要に加えて、AIによる予測モデルを最大限に活用し、効率的にヒット同定からリード最適化に繋げる“Lab-in-the-Loop”リード創出プラットフォームをご紹介します。今回は難ターゲットに対するリード創出の事例などのケーススタディーを中心に、昨年のセミナーよりも更に具体的な活用事例をご紹介します。

問い合わせ先: akito.hata@axcelead.com

株式会社オンチップ・バイオテクノロジーズ

ドロップレット技術で、未来のバイオイノベーションを加速する

当社の Water-in-Oil(w/o)ドロップレット技術は、1滴の液体に秘められた可能性をハイスループットスクリーニングに活用したプラットフォームです。



問い合わせ先: メール info@on-chip.co.jp 電話 042-385-0461 (学会担当宛)

株式会社スクラム

3D オルガノイド培養の薬剤スクリーニングへの応用（アップデート）

3D 培養法やオルガノイド培養法の創薬研究における利点が言われる中で、薬剤スクリーニングの現場では、主にその簡便性とスループットの高さから、未だに細胞株を用いた 2D 培養法が使われています。一方で、複雑な疾患病態を in vitro で再現するには、細胞株を用いた 2D 培養法は不十分です。オルガノイドを用いた 3D 培養法は、2D 培養法では実現できない in vitro 疾患モデルの構築を可能にし、特にハイコンテンツイメージングなどを用いた表現型スクリーニングへの活用が有望視されています。

Inventia Life Science 社の RASTRUM プラットフォームを用いることで、再現性の高い 3D 培養アッセイプレートの高いスループットで作製することが可能です。さらに進化した最新モデルの RASTRUM Allegro は、オートメーションにも対応し、より創薬スクリーニングに利用しやすくなりました。

本セミナーでは、腫瘍モデル（腫瘍免疫モデル）と神経疾患モデルと中心に、3D オルガノイド培養の薬剤スクリーニングへの応用に関しての最新的话题を提供します。

問い合わせ先: hattori@scrum-net.co.jp（株式会社スクラム 服部徹）

スペクトリス(株) マルバーン・パナリティカル事業部

1 濃度カインेटクス解析によるチャレンジングなスクリーニング事例

本セミナーでは、革新的な分子間相互作用解析装置「Creoptix WAVEdelta」をご紹介します。WAVEdelta は、グレーティング結合干渉法(GCI)を原理とし、高感度かつ高 SN 比の測定を実現。流路一体型センサーチップにより、サンプル詰まりのリスクも低減しています。

特に注目すべきは、独自技術「waveRAPID™法」による 1 濃度カインेटクス解析。サンプル濃度を変えずにインジェクション時間を調整することで、従来の複数濃度測定と同等の情報を迅速に取得可能です。

この技術により、以下のような困難なスクリーニングが可能になります：

- ・ フラグメントなどの超低分子の高感度解析
- ・ 溶解性に課題のある低分子化合物の評価
- ・ 培養上清中の抗体をそのまま用いたスクリーニング
- ・ 精製膜タンパク質に対するフラグメントスクリーニング

当日は、技術の概要とともに、実際のスクリーニング事例をご紹介します。創薬やバイオ研究における新たな解析手法にご関心のある方は、ぜひご参加ください。

問い合わせ先: 廣瀬 雅子(masako.hirose@malvernpanalytical.com)

株式会社椿本チエイン

様々な容器、温度帯でのサンプル管理の課題解決にむけて

椿本チエインでは、-20℃度での保管管理が主流の低分子化合物から -150℃以下での保管が必要となる生体試料まで、様々な温度帯、試料容器の保管を実施してまいりました。近年では、-80℃での保管が必要な試料に対する管理の強化、また自動倉庫での利活用のお問い合わせを受けております。

中でも凍結された容器のサイズが様々なもの、またバーコードが添付されておらず、保管取り出しが体系的に管理、入出庫の運用が実施し辛いなど、管理と運用上の課題を頂いております。

セミナーではこれらの課題解決にむけた、管理、運用について当社の実績と流通分野で培いました倉庫運用管理のノウハウをご紹介します。

問い合わせ先: akimi.kawaguchi@gr.tsubakimoto.co.jp

日本ゼオン株式会社

高精度細胞イメージング評価を実現するマイクロプレート技術のご紹介

In vitro 薬剤スクリーニングにおいて、ヒト細胞の一角を成すヒト iPSC 由来分化細胞を用いた薬剤評価は、動物実験代替の一つとして期待され、細胞、培養プレートおよび評価機器等の包括的な生理学的に適切なモデル・アッセイ系の構築が取り組まれております。

本セミナーでは、鮮明な画像を短時間で取得可能にする細胞培養プレート（シクロオレフィンポリマー製マイクロプレート）を用いて培養した細胞のハイコンテンツアナリシス機器（共焦点イメージングサイトメーター）による細胞観察結果と、各種アッセイ事例をご紹介します。

問い合わせ先:

<https://www.zeonaurora.com/>

プロメガ株式会社

創薬を変える！HTS×3D 脳オルガノイドによる代謝解析

肥満は、遺伝的、ホルモンの、および炎症性の要因によって影響を受ける多面的な代謝疾患です。新薬開発において、食欲、エネルギー代謝、脂肪貯蔵を調節する主要な経路をターゲットにしており、GPCR、ホルモンシグナル伝達、炎症性サイトカイン、筋肉代謝に対する関心が高まっています。

近年、ヒト多能性幹細胞由来の 3D ブレインオルガノイドは、神経発達や疾患モデル、毒性評価における新たなプラットフォームとして注目されています。しかし、これらのモデルの機能評価・スクリーニングは高スループットには不向きとされてきました。本セミナーでは、プロメガが開発した発光ベースの代謝アッセイを用い、微量サンプル・洗浄不要で迅速に読み出せる HTS 対応の代謝評価系をご紹介します。従来の 2D 細胞系では得られない生理的情報を、3D ブレインオルガノイドと HTS の融合により、創薬研究に新たな可能性をもたらすヒントを得ていただけます。

問い合わせ先: prometec@jp.promega.com

ベックマン・コールター株式会社

ベックマン・コールター製自動化システムと SAMI EX ソフトウェアを用いた *in vitro* 評価自動化について



ベックマン・コールター製自動化システムと SAMI EXソフトウェアを用いた *in vitro*評価自動化について

見月 俊吾 様 (塩野義製薬ワクチン事業本部ワクチン開発研究所)

塩野義製薬では、25 年以上前から自動化システムを用いた HTS の経験と実績がある。近年、低分子化合物ライブラリを用いた HTS に加え、多様なモダリティや新規技術に対応した *in vitro* 評価が求められるようになってきた。そこで私たちは、ベックマン社製自動化システムと SAMI EX ソフトウェアを導入し、様々な *in vitro* 評価に対して柔軟に対応できる自動化システムの構築に取り組んできた。本発表では、システム導入の背景から、複数機器を接続した設計、ベックマン・コールター社製自動分注機 Biomek i7 や SAMI EX ソフトウェアを用いた *in vitro* 評価自動化プロトコルの作成において工夫したポイント、今後の自動化拡張構想など、幅広い内容について紹介する。

席に限りがあります。聴講をご希望の場合はお早めにお申し込みください！！

問い合わせ先: bckk_ls_web@beckman.com

(担当: マーケティング本部 大滝)

株式会社モルシス

創薬研究を加速する！CDD Vault によるスマートなデータ管理と活用事例

研究開発の現場では、異なる専門性や所属・拠点を持つ多くの研究者が関与し、日々膨大で多様なデータが生成されます。こうした情報を効率よく活用するには、データを一元的に集約・整理し、誰もが迅速かつ的確にアクセスできる環境の構築が不可欠です。

CDD Vault は、米 Collaborative Drug Discovery 社が提供する、創薬研究向けのクラウド型研究データ管理プラットフォームで、以下のような機能を備えています：

- サンプル情報とアッセイ情報の登録・管理
- データの可視化と解析ツール
- 試料の在庫管理
- 電子実験ノート(ELN)
- タンパク質立体構造予測などの創薬 AI 機能
- 外部ツール連携を可能にする API

これにより、分野や拠点を越えた研究者同士のコラボレーションを促進し、安全かつ効率的なデータ共有と活用が可能になります。

また、CDD Vault は MOE や KNIME などの計算化学・ワークフローソリューションとも連携可能で、AI・機械学習ツールとの接続による拡張も柔軟です。

本セミナーでは、CDD Vault の全体像に加え、実際の活用事例を交えて、どのように研究データの管理と活用が変わるのかをご紹介します。

問い合わせ先：sales@molsis.co.jp

モレキュラーデバイスジャパン株式会社

オルガノイド培養の自動化とハイコンテントイメージングによる評価

近年、オルガノイドは創薬研究においてますます重要な役割を担うようになってきています。

ヒト細胞から構築されるオルガノイドは、従来の 2 次元培養系や動物モデルでは再現が難しい生理的な微小環境や疾患特性を反映できるため、より精度の高い薬効評価や毒性試験が可能です。

本セミナーでは、オルガノイド技術の創薬応用における課題である均一化と、オルガノイドの応答を定量的に捉えるために最適な手法であるハイコンテントイメージングの活用について紹介します。



問い合わせ先: infojapan@moldev.com

横河電機株式会社

理研オルガノイド研究におけるハイコンテンツデータ創出

セミナー講師: 国立研究開発法人 理化学研究所 生命機能科学研究センター
田中 信行先生

近年、生命科学分野では、生体内の複雑な環境を生体外で自己組織的に再現する三次元細胞モデル、特に iPS 細胞や ES 細胞由来のオルガノイド研究が進展しています。創薬分野では実験動物の代替として、また再生医療分野では移植用組織・臓器としての応用が期待されています。

オルガノイドの形成過程は極めて複雑であり、その理解にはイメージングからオミクス解析に至るまで、大量かつ高品質なデータの創出が不可欠です。一方、アカデミアにおける生命科学研究では、確立されたプロトコルの踏襲に加え、未知の生命現象を解明し画期的な発見を導くために、柔軟な思考と試行による新規手法の創出も重要です。

このようなデータ創出において、スループットと柔軟性の両立を図るため、理化学研究所では「オルガノイド×自動化」という取り組みを進めています。本取り組みでは、細胞培養、精密な細胞ハンドリング、遺伝子・タンパク質発現などの網羅的エンドポイントアッセイに加え、オルガノイドへの分化誘導過程を捉える最新のハイコンテンツアナリシスシステムである横河電機「CellVoyager CQ3000」を導入しています。

同システムは、長時間ライブイメージングを可能にするインキュベーターを内蔵しており、解析ソフトウェア「CellPathfinder」との組み合わせにより、観察から解析まで一貫性のある実験を実現します。

本セミナーでは、理化学研究所における iPS/ES 細胞からのオルガノイド形成および、そこから得られるハイスループットな表現型データの創出に関する取り組みを紹介합니다。従来の枠にとらわれない柔軟な研究デザインとデータ解析を通じて、

複雑な生命現象の理解を深め、創薬や再生医療への応用可能性を示します。

問い合わせ先: lsc_news@cs.jp.yokogawa.com

株式会社レビティジャパン

1. 細胞内取り込み解析の新規ツール pHSense
2. Cell Painting を超えて - ライブ Cell Painting とターゲットに合わせたペインティング

[Topics1] 細胞内取り込み解析の新規ツール pHSense

新開発の pH 感受性 Eu 蛍光試薬 pHSense™を標識試薬として使用した、まぜるだけのプレートベースアッセイを開発しました。アゴニスト依存的な GPCR インターナリゼーションや、エンドサイトーシスによる ADC 等の細胞内取り込みを、生細胞内でリアルタイムまたはエンドポイントで検出できます。この新規試薬の特長と、Revvity の時間分解蛍光搭載のプレートリーダーでの新しいアプリケーションをご紹介します。

[Topics2] Cell Painting を超えて - ライブ Cell Painting とターゲットに合わせたペインティング

Cell Painting は細胞の形態変化を包括的に記述する手法です。また、細胞種や染色ターゲットを統一することで研究室間での比較を可能にした画期的な手法です。近年ではこの概念を拡張し、ライブセルでの使用や特定のアプリケーションに特化したペインティングへの取り組みも始まっています。セッションでは、その概要と Revvity のアプリケーション特化型の Cell Painting キットについてご紹介します。

問い合わせ先: www.revvity.co.jp/contact-us

ローツェライフサイエンス株式会社

ロバストな完全自動化フローサイトメトリーシステムの構築

【発表者】

藤山 真吾

アステラス製薬株式会社 オンコロジーリサーチ バイオロジクスエンジニアリング
バイオロジクスディスカバリープロセス研究グループ

【要旨】

近年、創薬研究において目的外に分化した細胞や免疫原性評価などのレア細胞検出の需要が増加している。これらの検出には高い感度と定量性が求められるが、検出限界や定量下限は実験のロバストネス(頑健性)に依存するため、手技のヒト間差はアッセイ系の性能に与える影響が大きい。

我々は、ロバストなアッセイ系を構築するために全自動細胞実験プラットフォームであるスクリーニングステーションにフローサイトメトリーを統合した。Jurkat 細胞を用いてフローサイトメトリー前処理の各ステップを検討し、最後にアッセイ全体の

性能を評価した。実験をマニュアルで実施した場合は細胞検出率が $48.8\% \pm 5.7\%$ (CV=11.6%) であった。一方で、自動化法では細胞検出率 $73.7\% \pm 2.0\%$ (CV=2.8%) であった。さらに、自動化法の分析性能を明らかにするために 1-100 細胞の PD-1 発現 Jurkat 細胞を 1×10^5 cells の Jurkat 細胞にスパイクし検出下限、直線性、CV% を評価した。平均検出率は 69%、決定計数 (R^2) は 0.985、検出下限は 4 細胞 (0.004%) であった。結論として、我々はスクリーニングステーションにフローサイトメリーを統合し、頑健性の高い全自動フローサイトメリーアッセイシステムを構築した。

本発表では、構築したアッセイ系の性能や構築過程で工夫した点について紹介する。

参考資料: 発表予定内容の出版済み論文

問い合わせ先: sales@rorze-ls.com (担当: 営業部 田中健之)

