

創薬ソリューションプロバイダー
Axcelead Drug Discovery Partners 株式会社



ハイスループットスクリーニング
(HTS)

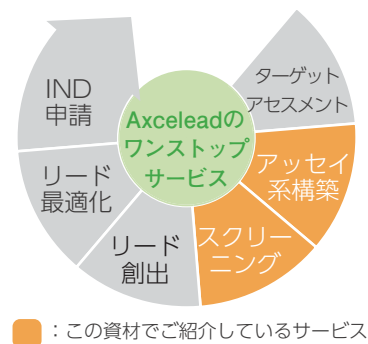
お客様のヒット化合物探索をサポートいたします！

- ▶ 豊富な経験と確かな技術でアッセイ系構築からヒット化合物探索までを丁寧にサポート
- ▶ 多様なターゲットクラスに対する HTS
- ▶ 高品質かつ多様な構造を持つ大規模な化合物ライブラリー
- ▶ ヒット化合物のフォローアップまでワンストップでサポート

500以上
HTS実績

90%以上
高ヒット率を誇るHTS

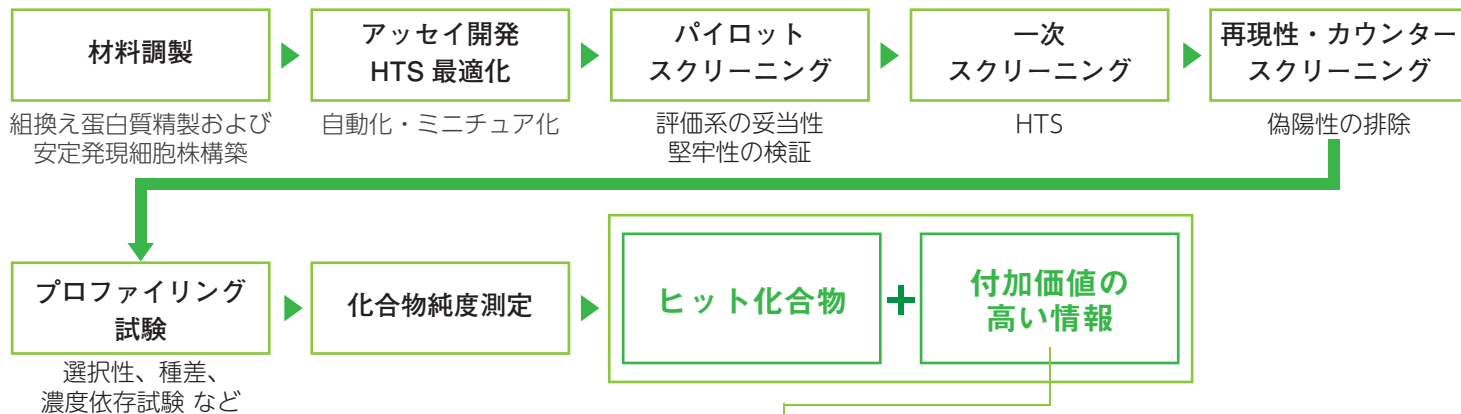
150万以上
業界最大級の質の高い化合物ライブラリー



豊富な経験と確かな技術でお客様のヒット化合物探索を丁寧にサポート

- ▶ 材料調製、アッセイ系構築からヒット化合物同定までお任せください。
- ▶ お客様のご要望に基づいて、最も成功率が高い HTS 系をデザインしてご提案いたします。

■ 最適な化合物探索に向けた、スクリーニングサービスフロー（一例）



- ▶ ヒット化合物に、Axcelead の強みを生かした **付加価値の高い情報** を加えてご提供いたします。

▶ 過去試験に基づく情報（Axcelead のオリジナル）

- 細胞傷害性情報（弊社にて傷害性測定データを保有する化合物のみ）
- 化合物のアノテーション情報
 - 武田薬品工業株式会社において過去に実施したスクリーニング結果に基づき、ヒット化合物の アノテーション情報をターゲットクラスレベル（GPCR、キナーゼなど）でご報告

● キナーゼ選択性情報*

- 約 300 種類のキナーゼに対するパネル試験系を保有
- 測定データを有するヒット化合物について、選択性情報の付加が可能

▶ Axcelead 化学部門によるコンサルティング

- 独自アルゴリズムによるヒット化合物のクラスタリングに加え、各クラスタの構造の特徴について Axcelead ケミストの視点からコメントを付加

▶ 物性値情報（QED、HBA/HBD、AlogP、tPSA、芳香環数、Fsp3 など）

<結果報告イメージ>

Compound No	Cluster ID	Primary assay (p50 (nM))	Counter assay (p50 (nM))	Primary assay (pIC50 (nM))	Counter assay (pIC50 (nM))	Chemical properties				Purity (%)	Notes
						HW	HBD	HBA	AlogP		
AXL1	1	8.0E-08	>1.0E-05			95.5	kinase A inhibitor
AXL2	1	2.9E-07	>1.0E-05			90.5	kinase A inhibitor
AXL3	1	4.9E-06	>1.0E-05			95.3	kinase A inhibitor
AXL4	2	3.2E-08	>1.0E-05			85.4	promiscuous
AXL5	3	1.2E-06	>1.0E-05			97.2	
AXL6	3	2.5E-06	>1.0E-05			98.1	
AXL7	3	4.2E-06	>1.0E-05			95.4	

*: 【キナーゼ選択性情報活用例】

- 表現型スクリーニングのヒット化合物の MOA 情報
- 標的分子スクリーニングのヒット化合物の選択性情報
- オフターゲットによる毒性リスクの評価

多様なターゲットクラス に対するアッセイ系構築および HTS

- ▶ ほぼすべてのターゲットクラスやフェノタイプのアッセイ系構築および HTS を実施できるプラットフォームが整備されています。
- ▶ HTS 系に最適な材料調製（組換え蛋白質精製および安定発現細胞株構築）をご提案し、実施いたします。

その他、お気軽にお問合せください。

■ Axcelead の主なプラットフォーム

- GPCR
 - 酵素
 - イオンチャンネル / トランスポーター
 - 核内受容体
 - PPI (protein-protein interaction)
 - 表現型スクリーニング
- 例) ハイコンテンツ、レポーター遺伝子、
遺伝子発現解析



IN Cell Analyzer 6000 (GE Healthcare)



HORNET HTS-10CB (FUJIFILM Wako)



RapidFire MS (Agilent)



Syncropatch 384 (Nanion)

高品質かつ多様な構造を持つ大規模な化合物ライブラリー

- ▶ お客様の HTS に最適な化合物ライブラリーをご提案いたします。

Axcelead 保有
ライブラリー

150 万
化合物

■ Diversity ライブラリー

- Pooled ライブラリー* **782,000** 化合物
- Single ライブラリー **79,000** 化合物

*: 一つのウェルに 10 種類の化合物が
プールされたライブラリーです。短期
間に多検体の HTS を実施できます。

- ▶ リードライクネスと多様性を追求した Pooled ライブラリーと Single ライブラリーを保有しています。

■ Focused ライブラリー **100,000** 化合物

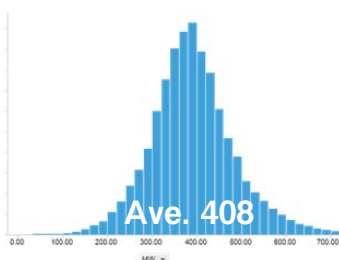
- ターゲットクラス別 (キナーゼ、GPCR、プロテアーゼ、PPI)
- CNS
- Macrocyclic
- sp³ rich
- Covalent
- Extended rule of 5
- 表現型スクリーニング用
- Fragment
- Natural product
- Annotation

- ▶ 表現型スクリーニングを指向した低細胞傷害性化合物ライブラリーや作用機序情報を有するアノテーションライブラリーを保有しています。

お客様の化合物ライブラリーをスクリーニング
することも可能です。

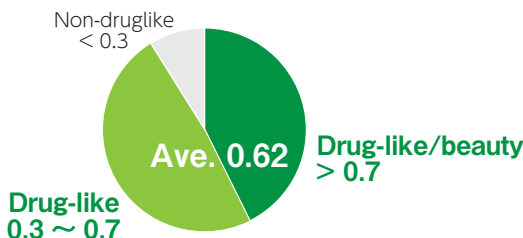
質にこだわったライブラリー

■ 分子量分布の多様性



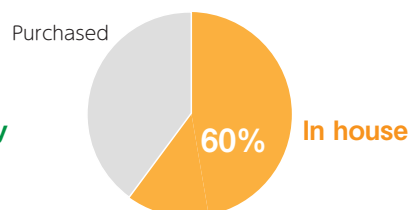
■ 高いドラッグライクネス

QED: Quantitative Estimate of Drug-likeness



■ 高い in house

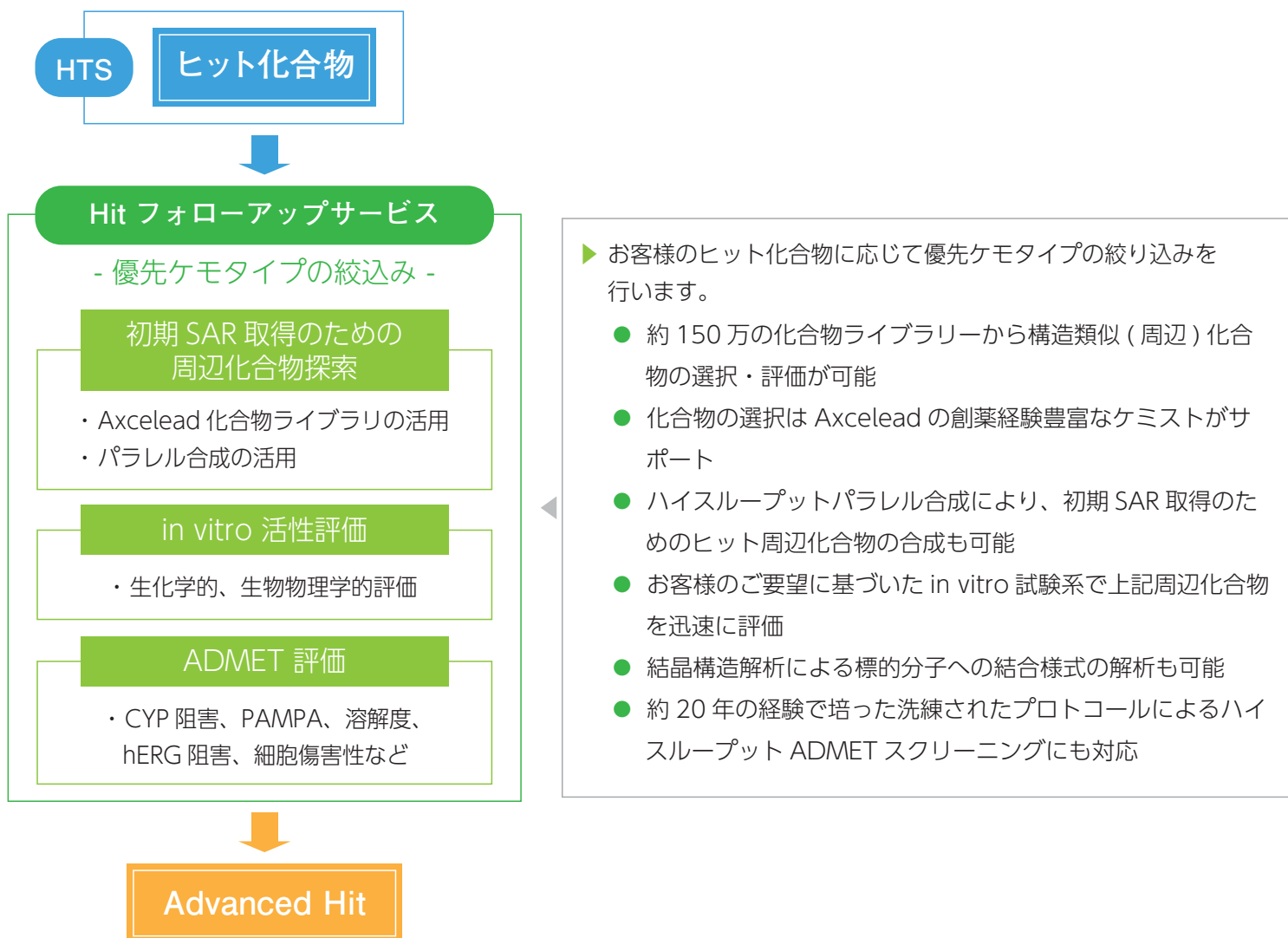
デザイン化合物比率



HTS のサービスをご提供させていただいたお客様へ

ヒット化合物のフォローアップをワンストップでサポート

- ▶ ヒットケモタイプからの優先ケモタイプ (Advanced Hit) 選抜を Axcelead にお任せいただけます。
- ▶ 短期間で効率よく優先ケモタイプを選別していただけます。



■ Axcelead の生物物理学的評価

- 質量分析 (AS-MS)
- サーマルシフトアッセイ (TSA)
- NMR
- 等温滴定型熱量測定 (ITC)
- 表面プラズモン共鳴 (SPR)
- X 線共結晶構造解析

活用例) SBDD、FBDD、MOA 解析



Triple Quadrupole LCMS (Agilent)



Biacore S200 (GE Healthcare)



MicroCal iTC200 (Malvern Panalytical)