

CAS BioFinder®
複雑なバイオ創薬を
シンプルに
—成功に導く3つの柱—

CAS

A division of the
American Chemical Society



目次

3

バイオ創薬の課題

4

適切なターゲットの選定

9

適切な分子の最適化

12

リスクの早期特定

14

創薬に“推測”は通用しない

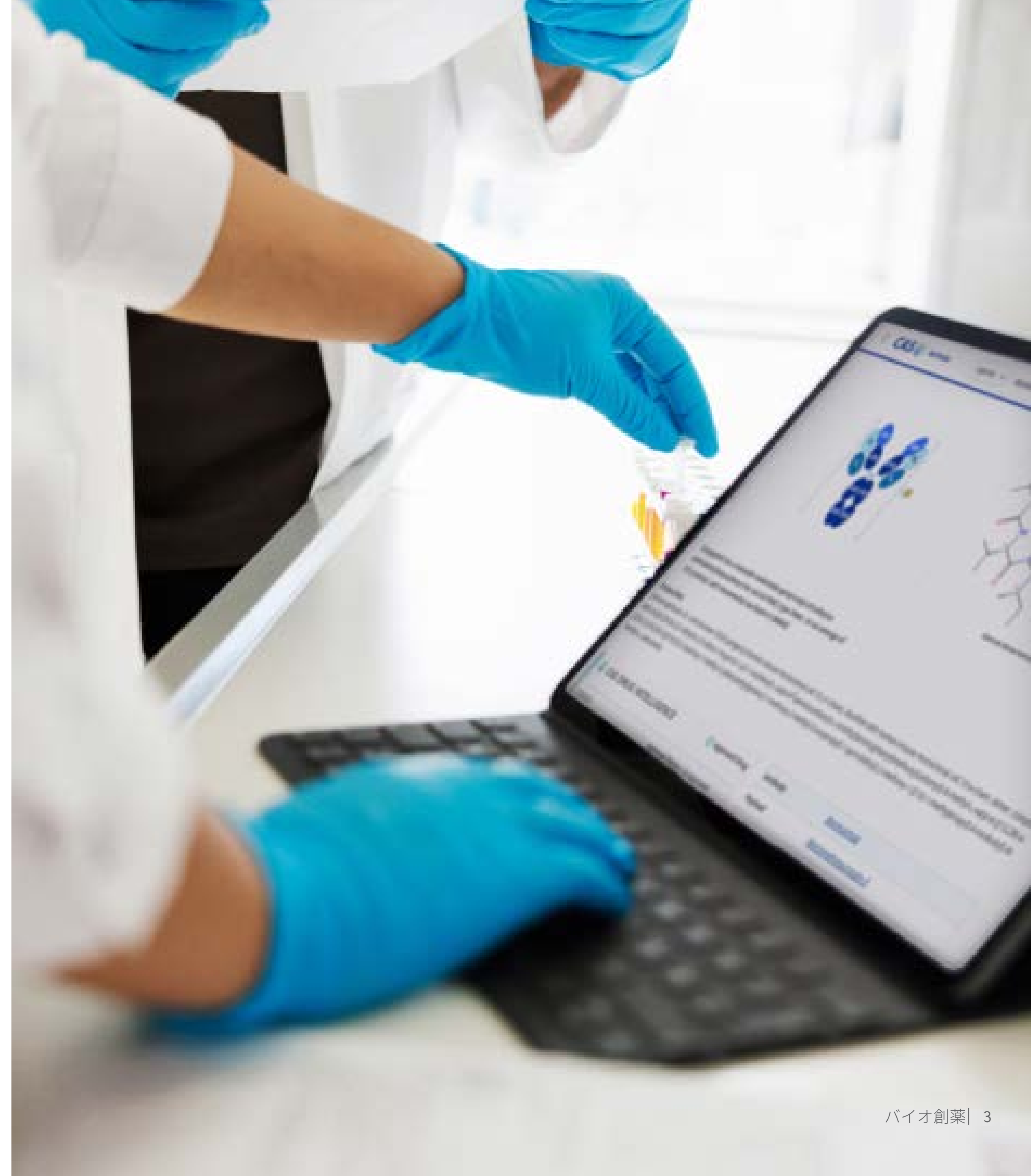


バイオ創薬の課題

新たなバイオ医薬品モダリティの登場により、革新的な治療法の可能性は、これまでにないスピードで広がっています。一方で、創薬研究の加速は新たな複雑さも生み出し、革新的なパイプラインを停滞させる要因にもなり得ます。より安全で効果的な治療法への需要が高まる中、創薬チームは、よりスマートに設計し、より迅速に行動し、より厳しい安全性・製造・規制基準の遵守というプレッシャーに直面しています。

スピードが求められる創薬ワークフローにおいて、注力すべき対象を見誤ることは、開発の前進と後退の分かれ目になり得ます。真のポテンシャルを秘めたターゲットはどれか？どの候補に投資価値があるのか？初期フェーズの成功が、後期フェーズの脆弱性を隠していないか？

本資料では、バイオ創薬における3つの重要な課題を取り上げます。さらに、統合された創薬プラットフォームが、いかに適切なターゲットの優先順位付けと有望な候補への投資をどのように支援し、より安全な治療薬の開発を促進するのかを紹介します。



1

適切なターゲットの選定

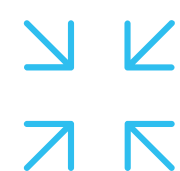
適切なターゲットを見つける第一歩は、的確な情報の入手から始まります。疾患の生物学的メカニズムやパスウェイ、ターゲットに関する重要な知見は、散在する論文や互いに独立したデータベースの中に埋もれていることが少なくありません。その結果、創薬研究者は、本来の分析に着手する前に、手作業で情報を整理・関連付ける作業に多くの時間を費やしています。

科学および知的財産（IP）の全体像を把握できなければ、創薬における最も基本的な問いでさえ、的確に答えることは困難です。

- 注目しているターゲットについて、現時点で何が明らかになっているか？
- モノクローナル抗体や抗体薬物複合体（ADC）などのバイオ医薬品において、すでに研究が進んでいないか？
- ターゲット、または関連するバイオ医薬品モダリティに対して、すでに特許が存在するか？

分散したデータと変化の激しいIP環境は、意思決定を停滞させるだけでなく、治療上の意義や新規性に乏しいターゲットに貴重なリソースを投じるリスクを招きます。**こうした断片的なデータを、意味のある意思決定へとつなげるには何が必要なのでしょうか。**

断片化なデータを創薬ワークフローの原動力に変える3つのステップ



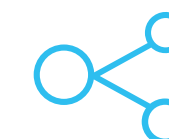
統合

学術文献、データベース、特許情報を、検索可能な単一のプラットフォームに統合。情報の分断を解消し、情報検索を効率化するとともに、関連データへのアクセスをスムーズにします。



標準化

生物学データベース、抗体配列、薬理学データ全体にわたってフォーマット、略語、識別子を標準化。データの不整合を減らして、クロスチェックを簡素化し、分析のスピードアップを実現します。



連携

信頼性の高い識別子を用いて関連するエンティティ（例：抗体、ADC、タンパク質ターゲット）をリンク。データを統一し、潜在的な相関関係を可視化することで、ワークフロー全体におけるインサイト創出を後押しします。

このようなデータ統合の実現は、バイオ創薬を加速させる上で極めて重要ですが、そのためには大規模かつ継続的な投資が必要です。統合されたデータがなければ、研究者は学術誌やデータベース、その他の情報源に散在する断片的な情報を手作業でつなぎ合わせることに追われ、優先度の高い業務に注力できません。バイオ医薬品に関連するデータが量・複雑さとも増大しつづける中で、創薬チームはそのスピードに対応していけるのでしょうか。



CAS BioFinder®によるターゲット同定のサポート

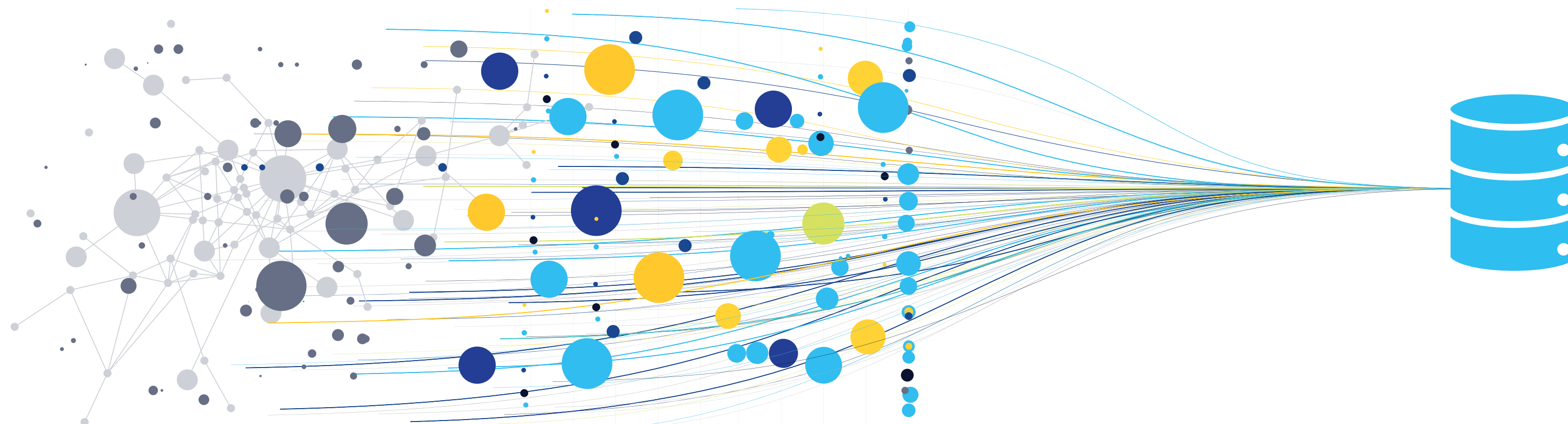
複雑なバイオ創薬において、研究者に必要なのは、散在するデータではなく、相互に関連付けられた知見です。
CAS BioFinderは重要な情報へのアクセスを効率化し、**迅速かつ確信を持った意思決定を支援します。**

CASの専門家は、創薬関連情報を一元化するだけでなく、体系化・検証・相互に関連付けたうえで、独自のインターフェース上に整理しています。これにより、以下の情報源から厳選された情報へ容易にアクセスできます。
これにより、以下の情報源から厳選された情報へ容易にアクセスできます。

- 何千ものライフサイエンス分野の主要な学術雑誌
- 世界100ヶ国以上の特許発行機関から発行された特許
- CAS SciFinder®の基盤であるCAS Content Collection™を含む、化学・生物学・薬理学データベース

科学データの全体像:
膨大な非構造化データ

CAS BioFinder:
創薬データを一元化したデータソース



CASBioFinder

Proteinsserotonin 1d beta recepto

Draw

[Return to Results](#)

HTR1B

5-hydroxytryptamine receptor 1B

SummaryPharmacologyLigands (5,034)Diseases (256)Chemical Space

Crystal structure of the chimeric protein of 5-HT1B-BRIL in complex with dihydroergotamine (PSI Community Target)



4IAQ

Organism

Homo sapiens

Identifier	Method	Resolution	Chain	Positions	Source
4IAQ	X-Ray	2.80 Å	A	304 - 390 / 33 - 239	PDB
4IAR	X-Ray	2.70 Å	A	306 - 390 / 33 - 239	PDB
5V54	X-Ray	3.900 Å	A/B	304 - 390 / 37 - 239	PDB
6G79	EM	3.78 Å	S	34 - 390	PDB
7C61	X-Ray	3.0000 Å	A	306 - 390 / 33 - 239	PDB

Synonyms

5-hydroxytryptamine (serotonin) receptor 1B
5-hydroxytryptamine (serotonin) receptor 1B, G protein-coupled
Serotonin 1D beta receptor
Serotonin receptor 1B

External Links and Identifiers

Alliance of Genome Resources: [HGNC:5287](#)
ChEMBL: [CHEMBL1898](#)
Ensembl gene: [ENSG00000135312.7](#), [ENSG00000135312](#)
HGNC: [HGNC:5287](#)
NCBI Gene: [3351](#)
[View More](#)

見落としのない研究体制を実現するために

CASの科学者とデータエキスパートは、日々、科学文献や特許情報を手作業で抽出・精査・検証しています。、これにより、研究者が情報の正確性や信頼性に迷う必要はありません。CASの専門家は、タンパク質、遺伝子、疾患に一貫した識別子を付与し、関連する化学、生物学、および薬理学データを結び付けることで、異なるソース間でも分かりやすく整理された情報環境を提供します。

統合された情報ソースを活用してターゲットを調査する

CAS BioFinderは、UniProt、NCBI、PDBなど、信頼性の高い権威ある情報源を1つのプラットフォームに集約しています。この統合により、ターゲット名称の統一やタクソノミーの共通化が行われ、十分な背景理解に基づいた検討が可能になります。その結果、疾患メカニズムや生物製剤の創薬ワークフローにおいて、標的タンパク質とリガンドの比較が容易になり、迅速かつ確信を持ったインサイトへと導きます。

CAS BioFinderのタンパク質、分子、疾患などのデータには、検索可能な同義語リストが含まれています。また、外部の主要な情報源とも連携し、正確で分かりやすい情報提供を実現しています。



膨大なデータに埋もれないために

CAS BioFinderを活用することで、競争が激化しているターゲットや進展の見込みがないターゲットを避け、治療薬開発において最も有望な分野に注力することができます。ターゲットの新規性、関連性、創薬対象としての適格性を明確に把握することで、さらなる投資を行うべき**最適なターゲットを優先順位付け**することが可能になります。

CAS BioFinderは、新規性、関連性、知的財産上のリスクを事前に可視化することで、チームが創薬に適したターゲットを迅速に同定できるよう支援します。これにより、十分な情報に基づいた投資判断が可能となり、大きな損失につながる判断ミスを回避できます。しかし、適切なターゲットの同定は、あくまで最初のステップに過ぎません。真の価値は、そのターゲットに作用する最適な分子を選定し、最適化することにあります。

適切な分子の最適化

どんなに優れたターゲットであっても、適切な候補物質がなければ成果にはつながりません。バイオ医薬品における創薬では、リード化合物の優先順位付けや分子最適化に必要な判断材料が不足していることが少なくありません。

大規模なデータの欠落や可視性の低さにもかかわらず、創薬研究を行う生物学者は開発プロセスの初期段階で重大な判断を下すことが求められており、その結果、最適化の機会を逃したり、十分に差別化されていない候補化合物を開発段階に進めてしまうリスクが高まります。

リード最適化の壁を乗り越えるために

候補物質のスクリーニングとリード最適化を効率化するには、候補物質の構造、作用機序、機能をいかに的確に把握できるかどうかが鍵となります。では、何が障害となっていて、どのようにすれば乗り越えることができるのでしょうか？

障壁	データに基づくソリューション
抗体やバイオ医薬品において、 構造的・機能的な類似性を把握する能力の不足	既知の抗体医薬や過去の研究データを活用し、完全な一致がなくても類似性を予測
抗体およびADCにおける 構造活性相関（SAR）データの不足	文献情報や予測された生物活性情報に基づき、抗体構造やドメインを類似したスキファールドと比較
パーシャルアゴニズムやマルチターゲット調節に関する 機能的役割の不明確さや一貫性の欠如	公開データおよび予測データを活用し、機能的な関連性と選択性を評価

公開されている情報と予測情報を組み合わせることで、研究者は**重要なデータの欠落を補い**、最も有望な候補を迅速かつ確実に選定することができます。

CAS BioFinder：確かな知見に基づき、候補化合物を優先順位付けする

データに裏付けられた意思決定を可能にする関連付け・構造化されたコンテンツ

創薬ワークフローには、単なる生データへのアクセス以上のものが求められます。インサイトを引き出し、情報の空白を埋め、重複をなくして、確信ある決断を下すためには、データ間の深い繋がりが必要となります。CAS BioFinderは、専門家が厳選したコンテンツを提供し、創薬チームを支援します。

あらゆる抗体フォーマットにわたる、文献に基づいた薬理学的データおよび生物活性データを活用することで、分子の関連性や最適化について確信を持って判断できます。

Assay Detail

← Prev (1 of 2) Next →

Ligand

780758-10-3



Nimotuzumab

Target	Epidermal growth factor receptor (Protein)
Gene	EGFR
Assay Name	Surface plasmon resonance
Assay Type	Binding
Procedure	Surface plasmon resonance analysis
Function	Binder
Parameter	Kd
pValue	7.49
Value	0.032 μM
Disease	Disease of cellular proliferation
Experiment Type	in vitro
Organism	Homo sapiens
Source	World Intellectual Property Organization, WO2017060322 A2 2017-04-13

関連する治療領域で、すでに研究が行われているバイオ医薬品を特定することで、意思決定を迅速化できます。

CAS BioFinder

Ligands 780758-10-3

1,334 3 Retrosynthesis Predictive Analytics

Summary Pharmacology ADME Proteins (2) Diseases (3) Related Immunotherapeutics (18)

Nimotuzumab

CAS Registry Number: 780758-10-3

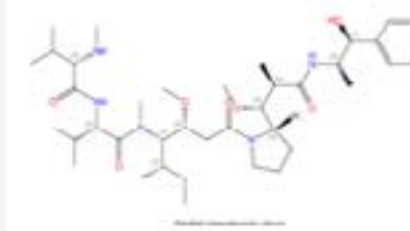


Nimotuzumab-Compound 64



Antibody	Nimotuzumab
Antigen	Epidermal growth factor receptor (EGFR)
Payload	Monomethyl auristatin E
Therapeutic Target	Microtubule
Drug-Antibody Ratio	3.5-4
Linker	Nimotuzumab-Compound 64 linker
Conjugation Method	Random conjugation through reduced inter-chain cysteines.

Nimotuzumab-Compound 75



Antibody	Nimotuzumab
Antigen	Epidermal growth factor receptor (EGFR)
Payload	Monomethyl auristatin E
Therapeutic Target	Microtubule
Drug-Antibody Ratio	3.5-4
Linker	Nimotuzumab-Compound 75 linker
Conjugation Method	Random conjugation through reduced inter-chain cysteines.

Nimotuzumab-Compound 76

Antibody	Nimotuzumab
----------	-------------

関連する治療領域で、すでに研究が行われているバイオ医薬品を特定することで、意思決定を迅速化できます。

抗体に関連する免疫療法薬を確認することで、すでに検討されているペイロードの組み合わせを把握できます。

 cas.org/ja

バイオ創薬 | 10

元文献に直接アクセスして、検討内容を裏付けることができます。

CASBioFinder

Ligands780758-10-3

Draw



Nimotuzumab

Number: 780758-10-3

Get References

1,334

3

Retrosynthesis

Predictive Analytics

...

Summary

Pharmacology

ADME

Proteins (2)

Diseases (3)

Related Immunotherapeutics (18)

CASSciFinder

Enter a query...

Draw

Return to Home

References

AllSubstancesReactionsReferencesSuppliersPatent Markush

View Related Results

1,334 Results

Sort: Publication Date: Oldest

View: Partial Abstract

Filter Results

Analyze Results

Behavior

Filter by

Exclude

Search Within Results

Document Type

Journal (540)

Patent (789)

Review (85)

Clinical Trial (37)

Commentary (4)

View All

Flags

Has DOI (485)

Has Claims (773)

Has PatentPak (789)

Has Related Substances

1

Transient expression in tobacco leaves of an aglycosylated recombinant antibody against the epidermal growth factor receptor

By: Rodriguez, Melym; Ramirez, Nadia L; Ayala, Marta; Freyre, Freya; Perez, Uncidio; Triguero, Ada; Mateo, Cristina; Selman-Houssein, Guillermo; Gavilondo, Jorge V; Pujol, Merardo

Biotechnology and Bioengineering (2004), 89(2), 188-194 | Language: English, Database: CAlplus and MEDLINE

When generating stably transformed transgenic plants, transient gene expression experiments are especially useful to rapidly confirm that the foreign mol. of interest is correctly assembled and retains its biol. activity. TheraCIM (CIMAB S.A., Havana) is a recombinant humanized antibody against the Epidermal Growth Factor receptor (EGFR), now in clin. trials for cancer therapy in Cuba and other countries. An aglycosylated version (Asn 297 was mutated for Gln 297) of this antibody was transiently expressed in tobacco leaves after up-regulation of expression of prokaryotic expression systems.

View More

Full Text

1

0

39

2

Methods for detection of ErbB cell surface receptor complexes as cancer biomarkers and therapeutic effectiveness of cleavage thereof

Assignee: Aclara Biosciences, Inc.

World Intellectual Property Organization. WO2004091384 A2 2004-10-28 | Language: English, Database: CAlplus

Analyze Results

Top Document Types

Patent

Journal

Review

Clinical

Rz

Patent Offices

1

671

CAS BioFinder内のすべてのデータポイントについて、出典文献をすばやく確認できます。

CAS BioFinderは、関連付け・構造化されたデータによって、**重要な情報の欠落を埋め**、確信を持って有望なバイオ医薬品候補を優先順位付けできるようにします。



リスクの早期特定

バイオ医薬品は一般に低分子化合物より成功率が高いものの、安全性の問題による後期フェーズでの失敗を免れるわけではありません。初期フェーズで安全性リスクを見落としていると、有望な候補化合物であっても、開発は後期段階で行き詰まります。その結果、臨床試験の失敗や開発期間の長期化を招き、大きなコスト負担につながるリスクをはらんでいます。

バイオ医薬品開発の初期フェーズでは、候補物質の作用機序における危険信号や有害転帰に関するエビデンスに基づく知見をもとに、開発継続か中止かを左右する重要な判断が行われます。しかし、安全性に関する重要なデータは、断片化していることが多く、取得が困難であったり、そもそも存在しなかったりする場合があります。その結果、オフターゲット相互作用や選択性、忍容性に問題を抱えた候補物質の開発を前進させてしまい、臨床試験段階で深刻な安全性リスクが顕在化しかねません。

安全性判断の精度を高めるデータ

研究者には、臨床試験が始まる前の段階から、候補物質がもたらし得るリスクをより明確に見極めることが求められます。

では、そうした危険信号を確実に捉えるのは、どのようなデータでしょうか。

データ	データに基づくソリューション
ADME/毒性データ	吸収、分布、代謝、排泄、および毒性リスク
選択性／オフターゲットデータ	オフターゲットでの予期せぬ相互作用を明確化
薬理プロファイル	複数の生体システムにおける作用を要約
生物活性データ	活性と有効性を定量化し、安全域を明確化

多くの新規化合物や新たなターゲット分子については、重要な安全性情報が欠落していたり、入手が困難であったりすることが多く、有意義な結論を導き出す妨げになっています。こうした情報の欠落を埋めるため、生物学者は、公開データと予測分析を組み合わせたツールを必要としています。それにより、**潜在的なリスクを明らかにし**、確信を持って開発を継続するか、中止するかを判断することが可能になります。

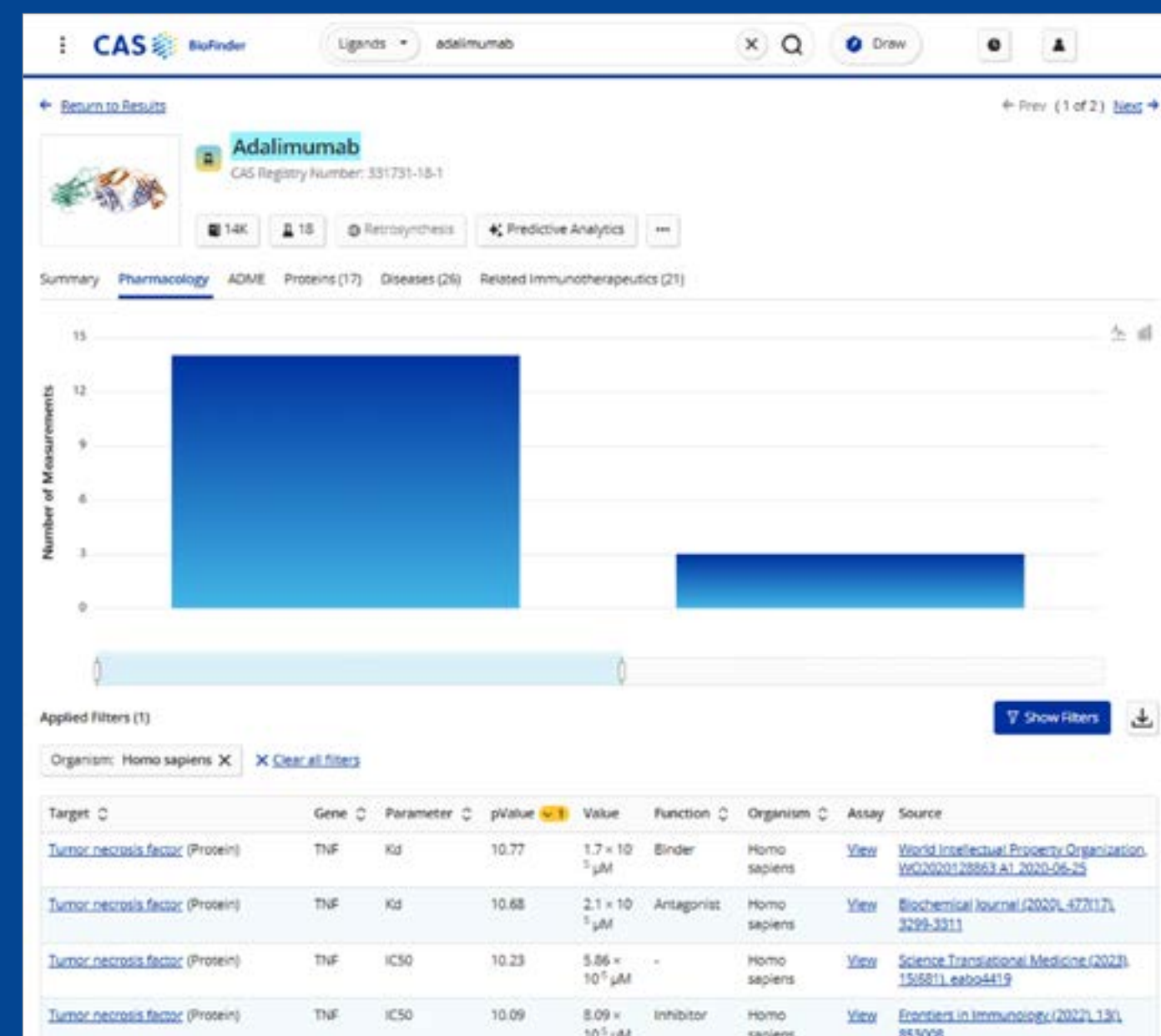


CAS BioFinder: 情報の空白を埋め、確信を持って実行・中止を判断

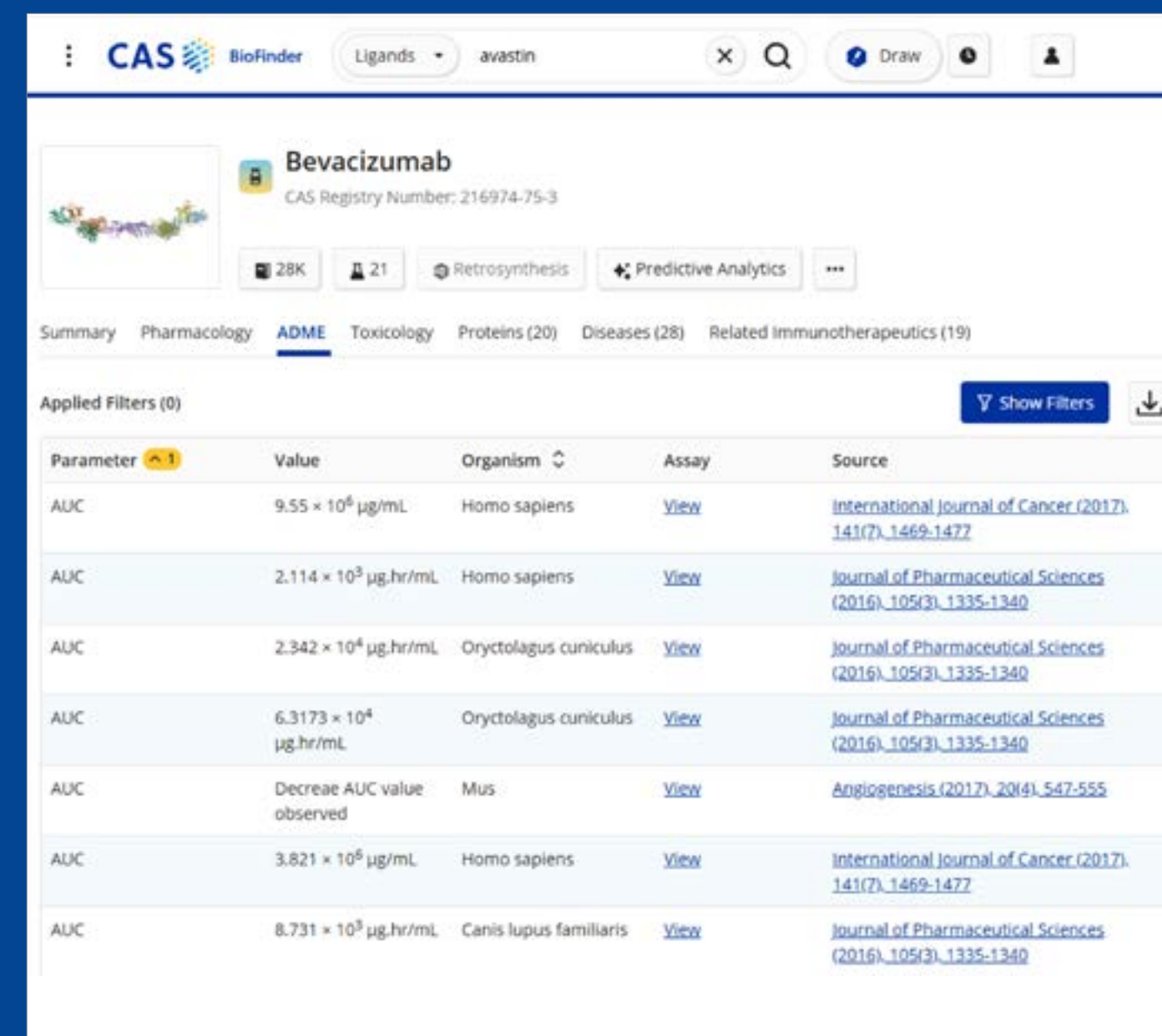
意思決定を行うには、十分な根拠が欠かせません。重大な「開発継続／中止」の判断を正当化し、**臨床試験に進める候補物質を自信を持って推奨する**には、エビデンスに裏付けられた明確な情報が必要です。CAS BioFinderは、創薬に関連する情報を一元化し、予測的な知見を加えることで、**文献情報が不完全な場合であっても**、安全性評価チームがリスクを早期に把握できるように設計されています。

CAS BioFinderの活用シーン

有害事象と生物活性データの関連性を**確認**



リガンドのADMEおよび毒性データの調査



パスウェイや細胞プロセスとの相互作用に基づき、生物学的リスク要因を**特定**



CAS BioFinderを活用することで、**創薬の初期フェーズにおいて潜在的なリスクを特定**し、後期フェーズで失敗するリスクを低減できます。これにより、開発を継続すべきか、中止すべきかを確信をもって判断することができます。また、公開データと予測的知見を組み合わせることで、開発後期に安全性リスクが顕在化することを未然に防ぎ、バイオ医薬品を患者様のもとへ、より迅速に届けることが可能になるでしょう。

創薬に“推測”は通用しない

あらゆる意思決定がスピード、予算、そして人々の人生を変え得る開発パイプラインに影響する創薬の現場では、信頼できる情報が不可欠です。しかし、データが散在していたり、一貫性がなかったり、欠落していたりすると、全体像を把握することが困難になります。特に、新規のターゲットや複雑な候補物質を評価する際には、その傾向が顕著です。

CAS BioFinderは、創薬に携わる科学者が研究開発のワークフローを加速させる知見を見つけられるよう開発されました。専門家の手によって厳選されたデータに、予測分析と生物学的知見を組み合わせることで、有望なターゲットを迅速に特定できるよう支援します。これにより、より安全な候補物質を優先的に選定し、パイプライン全体を通じて確信を持った意思決定が可能になります。

ターゲットの選定から安全性プロファイルまで、CAS BioFinderは重要な意思決定の迅速化を支援し、革新的なバイオ医薬品をより早く患者様へ届けるお手伝いをします。

！ 詳細については、[こちらをクリックするか、link.cas.org/biologics-contact](https://link.cas.org/biologics-contact) をご覧ください。



CASは、世界中の科学の知見をつなげて、人々の生活を向上させる画期的な進歩を加速させています。弊社は、世界中のイノベーターが今日の複雑なデータ環境を効率よく探索し、イノベーションへの道のりの各段階で革新をもって判断できるよう支援します。科学知識管理を専門とするCASのチームは、人の手で収集・精選された世界最大の権威ある科学データのコレクションを構築しているほか、必要不可欠な情報やサービス、そして専門知識を提供しています。さまざまな業界の科学者や特許専門家、そしてビジネスリーダーが、機会を発見し、リスクを軽減させ、そして共有知識を解き放つためにCASを活用しています。得られたインサイトがよりはやくイノベーションにつながります。CASは、米国化学会の情報部門です。

詳細は cas.org をご覧ください。