

次世代創薬シーズライブラリー運営規程

(目的)

第1条 本運営規程は、平成27年度創薬基盤推進研究事業「次世代創薬シーズライブラリー構築プロジェクト」で採択された研究機関等（以下、「提供企業」という。）から提供された蛋白-蛋白相互作用（PPI：Protein-Protein Interaction）を阻害する作用が期待できる中分子化合物等（分子量500程度以上、以下同様）によるライブラリー（以下、「本ライブラリー」という。）の運営について規定する。

(事務局)

第2条 本ライブラリーの運営、及び保管・管理は、国立研究開発法人日本医療研究開発機構創薬戦略部（以下、「創薬戦略部」という。）が行い、事務局も担う。

(本ライブラリーの使用目的)

第3条 本ライブラリーは、創薬戦略部が実施する創薬総合支援事業（以下、「創薬ブースター」という。）に採択された大学や公的研究機関等で生み出された優れた研究成果（以下、「創薬シーズ」という。）に基づく医薬品候補化合物を創生するために用いる。

(創薬戦略部の役割)

第4条 創薬戦略部は、本ライブラリーの保管・管理業務を委託する機関（以下、「管理CRO」という。）を選定し、提供方法、及び保管方法を決定し、選定した管理CROに適切に保管させる。

- 2 創薬戦略部は、スクリーニングの対象となる創薬標的を選定し、本ライブラリーを用いてスクリーニングを実施する。
- 3 創薬戦略部は、スクリーニングにて得られたヒット化合物の候補について、SAR解析、化合物デザイン、探索合成等の実験的検証（以下「実験的検証」という。）を実施し、その結果を踏まえヒット化合物を決定する。
- 4 創薬戦略部は、前項で決定した化合物の最適化を行う。また、必要に応じて、導出活動を行う。

(提供企業の役割)

第5条 提供企業は、平成27年度創薬基盤推進研究事業「次世代創薬シーズライブラリー構築プロジェクト」の成果として合成した中分子化合物等（以下、「中分子化合物等」という。）を、創薬戦略部が指定した保管先に、指定された方法で提供する。

- 2 提供企業は、化合物を提供する際に、中分子化合物等の構造式、分子量、純度等の必要な付随情報を創薬戦略部、及び創薬戦略部が指定する機関に開示する。なお、提供化合物

の純度は、最低限 90%以上とする。

- 3 提供企業は、創薬戦略部からの指示があった場合、実験的検証に協力し、必要に応じて国立研究開発法人日本医療研究開発機構と委託実験調査契約等の締結を行う。
- 4 第1項乃至第3項にかかわらず、提供企業が産学協働スクリーニングコンソーシアム（英語名称 Drug-discovery Innovation and Screening Consortium、略称 DISC。）の会員企業である場合、提供企業は創薬戦略部の合意を得た後に、「産学協働スクリーニングコンソーシアム規約」（以下「DISC 規約」という。）を遵守の上、中分子化合物等を DISC 規約に定める企業ライブラリー化合物として創薬戦略部に提供することができる。
- 5 前項の場合、当該提供企業は、保有する中分子化合物等を本ライブラリーに提供しないものとする。

（保管・管理）

第6条 創薬戦略部は、管理 CRO に委託することにより本ライブラリーの保管・管理を行う。

- 2 前項の業務委託にあたっては、別途、創薬戦略部と管理 CRO の間で本ライブラリーの保管・管理業務の委託に係る契約を締結する。
- 3 創薬戦略部は、本ライブラリーの保管・管理に必要な費用を負担する。
- 4 管理 CRO は本ライブラリー化合物が毒物及び劇物取締法、麻薬及び向精神薬取締法、覚せい剤取締法等の日本国内において所持・譲渡・廃棄・保管・表示・使用・輸送が規制されている化合物（以下、「規制化合物」という。）であるかを随時確認し、該当することがわかった場合は、遅滞なく所定の様式による「ライブラリー化合物廃棄申込書」を創薬戦略部に通知し、創薬戦略部の指示に従い廃棄する。

（化合物の提供）

第7条 提供企業は、平成29年4月1日以降遅滞なく、合成した6,000種類程度の中分子化合物等を創薬戦略部に無償で提供する。また平成32年4月1日を目処に合計15,000種類程度の化合物ライブラリーとなるように創薬戦略部に無償で提供する。なお、提供する化合物の種類数は創薬戦略部との協議により変更可能とし、提供する際には事前に創薬戦略部に相談を行い、提供時期及び輸送場所等を含めて創薬戦略部の指示に従う。

- 2 提供企業は、化合物を提供する際に、以下の内容に留意する。
 - （1）提供化合物は、規制化合物ではないこと
 - （2）提供化合物に関する知的財産権については別途協議を行う。また、事前に特許を取得した化合物である場合には、創薬戦略部に相談し、当該知的財産権の取扱いについて協議を行う。

- (3) 化合物提供前に純度確認等を行い、10mM の DMSO 溶液として 50ul を提供する。
なお、粉末での提供となる場合は秤量を行い、提供量についても報告すること。
- (4) 提供化合物の構造式、分子量、純度等の必要な付随情報の開示を行う。
- (5) 提供した化合物は、返還を求めることができない。

(スクリーニング)

第8条 創薬戦略部は、創薬ブースターに採択された創薬標的より本ライブラリーに適したスクリーニング標的を選定する。

2 創薬戦略部は、管理 CRO 又は自らが選んだ受託研究機関にスクリーニング業務を委託することにより、スクリーニングを実施する（以下、スクリーニングを受託する受託研究機関を「スクリーニング実施 CRO」という。）。

3 創薬戦略部は、前項の業務委託にあたって、別途、スクリーニング実施 CRO との間でスクリーニング業務の委託に係る契約を締結する。なお、業務委託の内容は次の各号に掲げる事項とすることができる。

(1) スクリーニング系の構築

(2) スクリーニングの実施

(3) カウンター・アッセイ系、二次アッセイ系の構築

(4) カウンター・アッセイ、二次アッセイの実施

(5) (2) (4) により得られた未加工のデータ（以下、「スクリーニング・データ」という。）の収集・整理

(6) (1) (3) により構築された評価系（以下、「スクリーニング評価系」という。）に関する情報整理

(7) (1) から (6) までを含むスクリーニング業務に関する結果の報告

なお、「カウンター・アッセイ」とは、スクリーニング系に対する特異性評価をいい、「二次アッセイ」とは、用量反応性、標的特異性、又は細胞系アッセイ等の *in vitro* 試験を意味するが、具体的にはスクリーニング標的ごとに創薬戦略部が定める。

4 創薬戦略部は、スクリーニング実施に必要な費用を負担する。

5 創薬戦略部は、スクリーニング実施 CRO にスクリーニング業務の進捗状況を適時報告させると共に、スクリーニング評価系及びスクリーニング・データをまとめた報告書（以下、「報告書」という。）、及び報告書に添付する資料等の電子データを創薬戦略部に納品させる。

(ヒット化合物の決定)

第9条 創薬戦略部は前条第5項の報告書をもとに、スクリーニングにて得られたヒット化合物の候補について、東京大学又は大阪大学構造展開ユニット等の研究機関（以下、「構造展開ユニット等」という。）に対し第4条3項に記載する業務を委託し、その結果を踏まえヒット化合物を決定する。

- 2 前項の委託に際し、創薬戦略部は構造展開ユニット等に対し、化合物情報及びスクリーニング情報の開示を行う。
- 3 創薬戦略部は、必要な場合には提供企業に実験的検証の協力を依頼し、必要に応じて提供企業と委託実験調査契約等の締結を行う。
- 4 提供企業は、創薬戦略部、及び構造展開ユニット等に秘密保持を求める技術上又は営業上の情報を文書で開示するときは、秘密であることを明記した上で、秘密にすべき情報を文書で特定しなければならず、口頭で開示するときは、秘密であることを明示して開示した上で、開示した日の翌日から起算して14日以内に秘密にすべき情報を文書で特定しなければならない。
- 5 前項に定める秘密保持義務は、開示した日の翌日から起算して5年間存続するものとする。

(知的財産権の取扱い)

第10条 提供企業は提供する化合物の構造式等に知的財産権がある場合には、提供する際に、予め創薬戦略部にその内容を通知しなければならない。

- 2 前項の通知があった場合、創薬戦略部が当該化合物の構造情報を必須の要件として知的財産権の出願等を行う前に、提供企業とその取扱いについて協議を行う。

(細則)

第11条 本運営規程に必要な細則は、本規程に定めるもののほか、創薬戦略部が別に定める。

附則

- 1 本運営規程は、平成29年4月1日から施行する。
- 2 本運営規程の一部を改正し、平成29年9月7日から施行する。
- 3 本運営規程の一部を改正し、平成31年4月1日から施行する。