

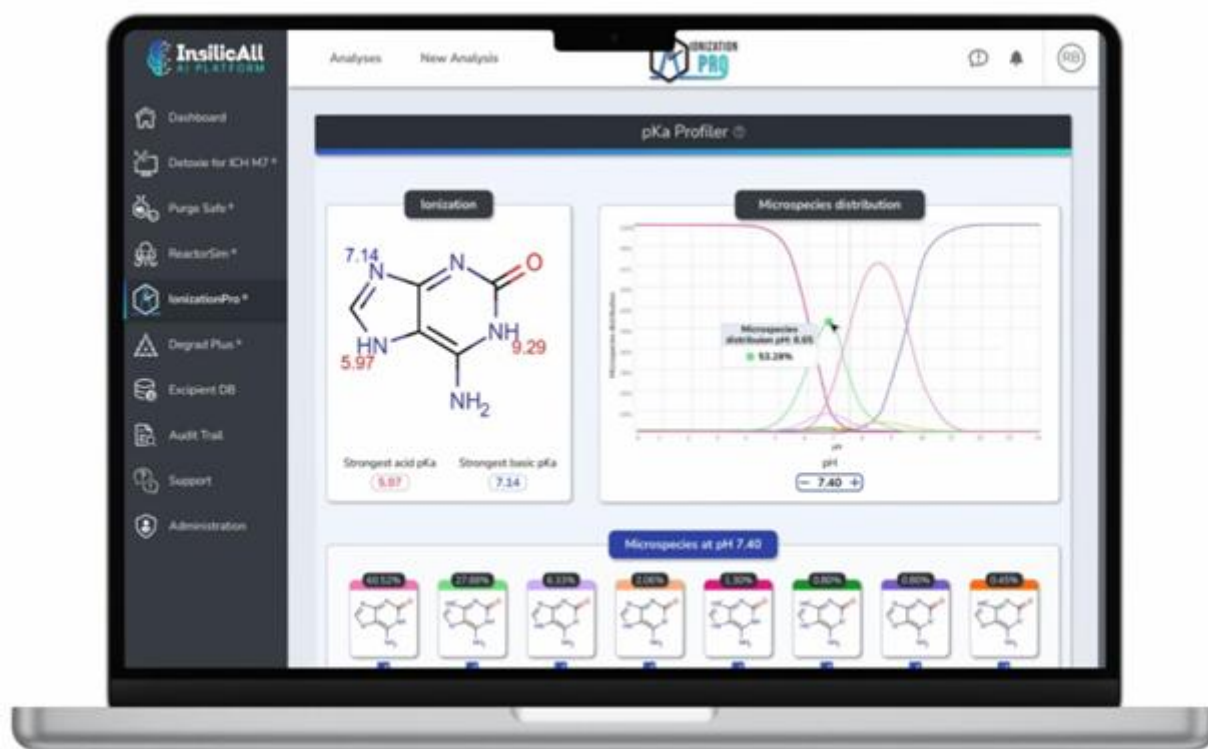
物理化学的性質予測プラットフォーム

Ionization Pro



人工知能を活用した物理化学的性質の予測

量子力学とグラフニューラルネットワークを組み合わせたAI駆動型モデルを用いて、pKa、多溶媒溶解度、保持時間、および親油性を予測します。



IonizationPro®は、包括的な物理化学的性質の信頼性の高い予測を提供します。

Graph Attention Network (GATv2) と量子力学計算を組み合わせたこのプラットフォームは、製薬および化学分野のチームが実験による検証を行う前に、意思決定を行うために必要な予測精度を提供します。

なぜIonization Proが選ばれるのか

開発期間を60%短縮

製剤設計のために何度も実験的なスクリーニングパネルを実施する必要がなくなります。Ionization Proでは、pKa、5種類の溶媒における溶解度、および保持時間を、数週間ではなく数分で予測できます。30万件以上の実験データポイントからなるデータベースには、医薬品骨格、分解生成物、およびメソッド開発中に遭遇する不純物が網羅されています。

研究、開発、製造の各部門に展開

Ionization Pro®は、各ステークホルダーに対し、役割に応じたアクセス制御、包括的な監査証跡、および世界各国の規制当局が承認する検証文書を提供します。

- 創薬チームが、望ましいADMEプロファイルを有する化合物をスクリーニングする
- 製剤開発担当者が、塩の状態および添加剤との適合性を最適化する
- 分析化学者が、分離法を開発する
- 品質保証部門が、規制当局への申請に向けた計算ツールの妥当性を検証する
- 製造部門が、プロセス中の不純物を監視する

さまざまな規制要件に対応

FDA 21 CFR Part 11、ANVISA RDC 658/2022、およびGAMP 5に準拠した検証文書を出力します。包括的な監査証跡により、すべての計算パラメータ、ユーザーの操作、およびデータ変更が記録されます。QRコードが埋め込まれた改ざん防止型のPDFレポートは、品質管理システムや電子実験ノート（ELN）に直接統合できます。

Ionization Proの予測性能

Ionization Pro® は、2,314種類の承認済み医薬品を用いて検証された包括的な物理化学的性質の予測を提供し、医薬品、化粧品、農薬、および化学品製造の各分野における規制対応向けに特別に設計されています。

Graph Attention Networkアーキテクチャを用いたpKaプロファイリング

査読付き文献、IUPAC参照データベース、ブラインド予測コンテスト (SAMPL6/7/8)、および製薬業界のデータセットから収集・精選された約33,000件の実験的pKa測定値を用いて学習させたGATv2 (Graph Attention Network v2) ディープラーニングアーキテクチャを用いて、酸解離定数を予測します。

脂肪族アミン、フェノール、N塩基性複素環（ピリジン）、N酸性複素環（ピロール）、アゾール（イミダゾール、トリアゾール）、スルホンアミド、アミノ酸、アニリン、グアニジン、バルビツール酸塩、キノロン系の承認済み医薬品2,314品目からなるベンチマークに対して検証されています。

多塩基酸内の各イオン化部位に対して独立したpKa値が予測されるため、二塩基酸および三塩基酸化合物の特性を正確に把握することが可能です。

予測結果が検証済みの化学空間の範囲外となった場合、適用範囲に関する警告を表示します。

クロマトグラフィーへの適用

特許、文献、および薬局方から収集した30万件以上の実験的分析データを活用し、あらかじめ設定された6つのグラジエントモデルにより、保持時間の予測が行われます。また、構造類似性マッチング機能により、不純物の確実な同定と手法開発の迅速化を実現します。

親油性と分配係数の分析

イオン化状態を考慮した熱力学的モデルを使用し、分配係数 (logP) およびpH依存性分配係数 (logD) を算出します。また、生理的なpH範囲における化合物の挙動を予測し、膜透過性および組織内分布特性を評価します。

溶解性の予測

メタノール、DMSO、ベンゼン、エタノールの4種類の有機溶媒に特化したGNNモデルと水溶性の予測機能が利用可能です。各モデルは、水素結合、双極子間力、および π - π 相互作用など、溶媒特有の相互作用を捉えています。

規制に対応した文書

FDA 21 CFR Part 11、ANVISA RDC 658/2022、およびGAMP 5のコンプライアンス要件に準拠PDFレポートを作成します。また、包括的な監査証跡により、すべてのユーザー操作とデータ変更を追跡し、規制当局への申請におけるデータの完全性と追跡可能性を確保します。

Ionization Proでの解析プロセス

1. 構造の入力と反応性の解析

原薬の構造（SMILES、InChI、または構造式）を入力されると、分子の特徴を即座に分析し、反応部位や分解されやすい官能基を特定します。

2. 条件の設定

標準的なICH安定性試験条件や特定の劣化パラメータを選択したり、研究デザインに合わせて環境要因（pH、温度、光、酸素濃度）をカスタマイズしたりできます。

3. 分解反応経路の生成

AIエンジンは、信頼度スコア付きの完全な分解経路ツリーを生成し、予測されたすべての不純物について、化学構造、正確な質量、化学式、および分解メカニズムを詳細に示します。

4. インタラクティブなリスク分析

インタラクティブな分解経路ツリーでリスクの高い経路を絞り込み、分子量や化学式で検索し、有効成分と添加剤間の製剤の安定性を損なう可能性のある相互作用を特定します。

5. 規制対応とレポート作成

各分解生成物について、その生成メカニズムを裏付ける根拠を盛り込んだ包括的なレポートを作成します。これらの改変不可能な文書は、規制当局への申請書類に添付できるよう設計されており、不純物プロファイリングや質量収支に関する議論を裏付けるために必要な科学的根拠を提供します。

製造元



輸入販売元



フィルジェン 株式会社
バイオインフォマティクス部

【お問い合わせ】

〒459-8011 愛知県名古屋市長区定納山1丁目1409番地

TEL : 052-624-4388 FAX : 052-624-4389

E-mail : support@filgen.jp URL : <https://filgen.jp/>

代理店

(Jul.,2026)