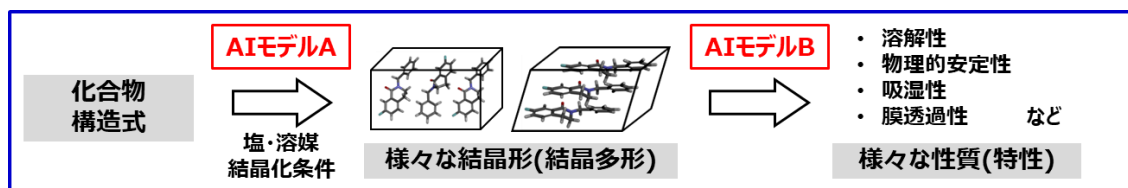


④ 結晶形予測 (LINC 内番号 : PJ22-a)

AI システムの概要



開発モデル (AIモデルA) 結晶多形予測 : 分子構造から結晶形を予測
(AIモデルB) 結晶特性予測 : 結晶構造から特性を予測

低分子化合物の化学構造式を入力すると、その化合物のフリー体や塩、共結晶体における安定な分子結晶の原子配置（結晶形）及びその物理化学的性質（物性）を予測する AI

AI システムの社会応用可能性

医薬品の原薬となる化合物が同じであっても結晶形が異なれば、溶解性や安定性、吸湿性など様々な物理化学的性質が異なる。それらの違いは薬効や吸収、体内動態、製造コストなどに多大な影響を及ぼすため、医薬品開発において、望ましい結晶形の選定は、重要な検討事項の一つである。一方で、近年の創薬研究の難易度の上昇により、化合物の構造が複雑化し、結晶化そのものの難易度も上がっているという課題もある。そこで、本 AI システムを結晶形の選定に活用し、医薬品候補化合物の分子結晶とその物理化学的性質が予測できれば、結晶化検討の効率化による開発期間の短縮やコスト低減、開発段階における物性を理由としたドロップアウトの回避に大きく貢献することが期待される。

これまでの成果

結晶形予測 AI プロトタイプが完成。基本特許出願完了。

参画メンバー（企業、アカデミア）

企業（50音順）

エーザイ(株)、小野薬品工業(株)、(株)クロスアビリティ、第一三共グループ

大正製薬(株)、武田薬品工業(株)、中外製薬(株)、帝人ファーマ(株)

東レ(株)、日本たばこ産業(株)

アカデミア

理化学研究所、公益財団法人神戸医療産業都市推進機構