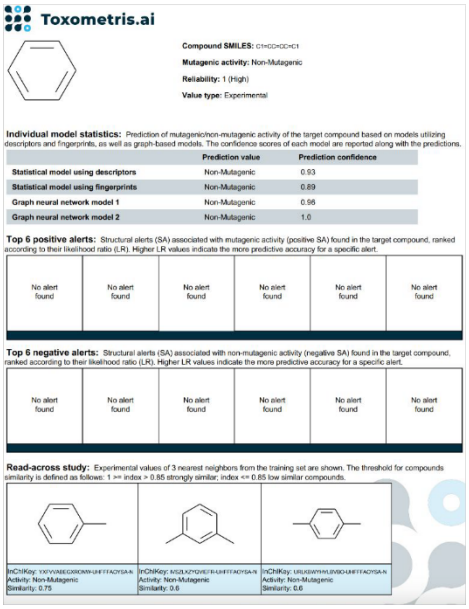
Toxometris.ai

毒性予測プラットフォーム

Toxometris社の毒性予測プラットフォーム Toxometris Portal は、AI を利用して化合物の毒性を予測するウェブベースのプラットフォームです。SMILES表記の化学構造を入力するだけで、規制当局への提出に対応した、OECD ガイドライン準拠かつ QMRF 文書付きの ADMET 予測結果（50 項目以上、規制対応レベル）を瞬時に取得できます。

- ✓ ライブラリ全体を計算手法でランク付けし、有望な候補化合物のみを選択して実験を進めることができる様になります。
- ✓ 毒性、ADME（吸収・分布・代謝・排泄）、物理化学的性質、および総合的なリスクスコアを網羅します。
- ✓ AI モデル、ルールベースの警告、リードアクロスを組み合わせ、単一の手法に頼ることなく、すべての予測結果を相互に検証します。
- ✓ すべての予測に QMRF（QSAR モデル報告書）が付属し、規制対応チームが利用でき追跡可能な記録を提供します。



毒性

変異原性、遺伝毒性、発がん性、心毒性、肝毒性、腎臓毒性、神経毒性、内分泌かく乱、ミトコンドリアおよび酸化的ストレス、皮膚感作性など

薬物動態

水溶解度、Caco-2およびPAMPA浸透性、ヒト腸管吸収、血漿タンパク結合、血液脳関門、CYP450阻害および基質、代謝クリアランス、排出および摂取輸送

物理化学

脂溶性、水素結合受容/水素結合供与、トポロジカル極性表面積、Fsp³、回転可能結合、リピンスキーの法則、量子電磁力学、SAスコア、汎アッセイ干渉化合物、GSKルール、ファイザーの法則など

リスクスコア

ADMETランキングシステム、医薬品らしさに基づいて化合物ライブラリーをスクリーニングし優先順位付け

Filgen® biosciences & nanosciences フィルジェン株式会社
【お問い合わせ】 バイオインフォマティクス部
TEL：052-624-4388　E-mail：support@filgen.jp
URL：https://filgen.jp/

代理店

(Oct.,2026)