Axcelead Drug Discovery Partners化学部門

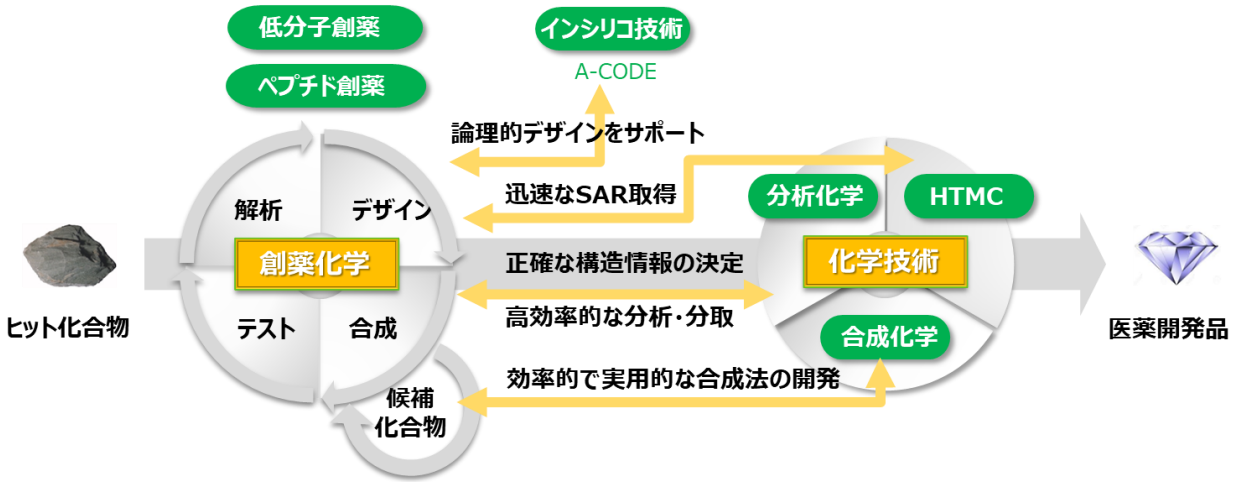
メディシナルケミストリーグループ 低分子創薬・ペプチド創薬

- ヒット同定からIND候補創出までの”All-in-One”創薬化学サービス
- 幅広い疾患領域およびターゲットクラスに対する新規化合物のデザインおよび合成
- コンサルテーション (化合物デザイン、ケモタイプ優先順位付けなど)

計算化学グループ

- コンピューター支援創薬 (SBDD/LBDD/FBDD)
- 分子動力学シミュレーションによる分子設計
- スクリーニングライブラリの設計
- バーチャルスクリーニング

A-code



パラレル合成グループ

- ハイスループットパラレル合成
- 反応条件最適化スクリーニング

分析化学グループ

- NMR構造解析
- 定量的NMR
- 単結晶X線構造解析
- HPLC分析・精製

合成化学グループ

- 実用的合成ルートの開発
- Non-GLP API合成 (～1 kg)
- 内部標準物質の合成
- ラベル体合成
- 推定代謝物の合成と同定
- プラットフォーム技術
- 高温、高圧反応
- ジェットミル粉砕

Copyright © 2022 Axcelead Drug Discovery Partners Inc. All Rights Reserved.
Not for circulation to third parties without Axcelead’s permission.

分析化学グループのサービス

■ 専門チームが創薬合成研究を加速するための価値ある情報をタイムリーに提供します

HPLC 分析・精製

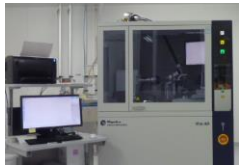
- 光学分割、光学純度測定 (キラル化合物)
- 分離精製、純度測定 (アキラル化合物)

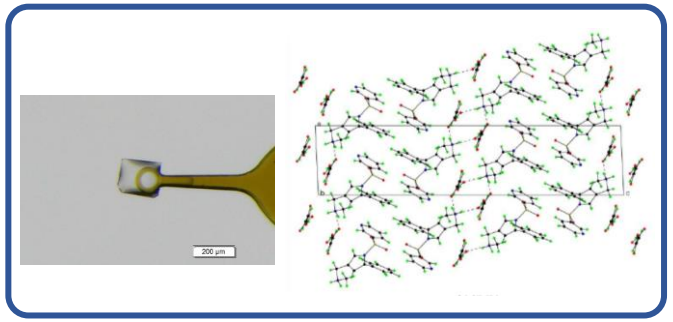
NMR 構造解析

- H-H、H-C、H-N、H-Fなどの2次元NMRの測定
- 低分子構造解析
- qNMR分析

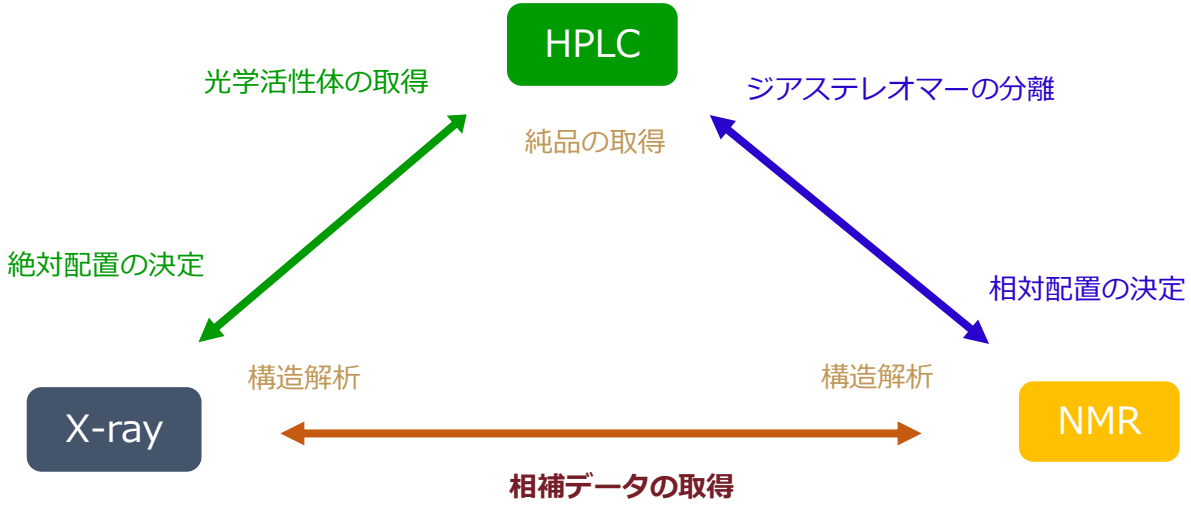
単結晶X線構造解析

- X線回折測定・解析
- 絶対配置の決定
- 結晶構造の確認





多彩なメニューを複合的に活用したサービス提供



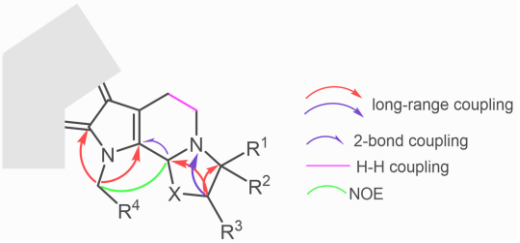
高純度の化合物が有益な情報と共に迅速に得られることから
ご好評いただいております

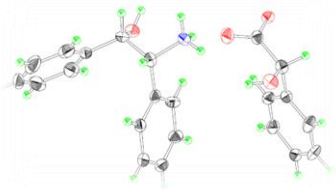
Copyright © 2022 Axcelead Drug Discovery Partners Inc. All Rights Reserved.
Not for circulation to third parties without Axcelead's permission.

分析化学グループのサービス

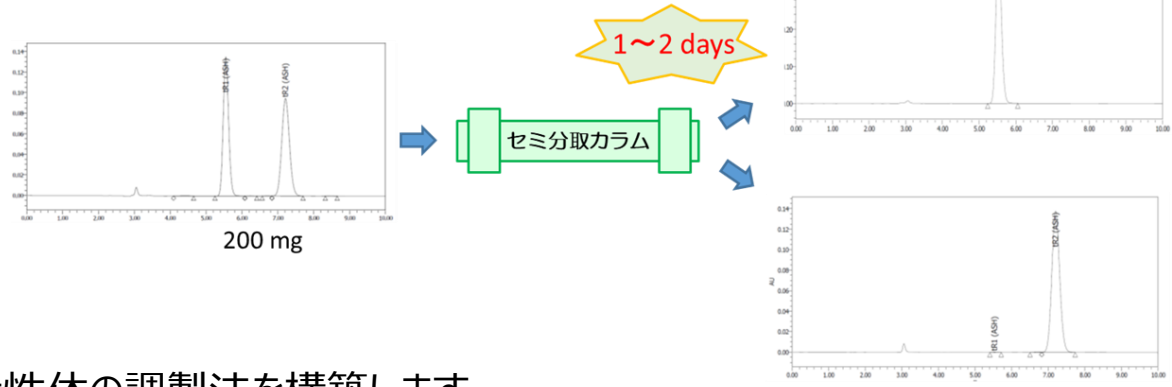
■ 創薬合成研究の様々なニーズにお応えします

➢ 合成研究で中間体や目的物の構造を確認したい
- NMR構造解析により2次元構造や相対配置の情報を提供します
- X線構造解析により3次元構造を提供します



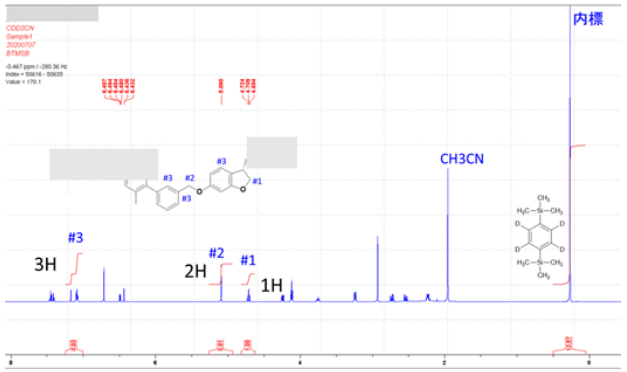


➢ 製造法検討で副生成物 (夾雑物) の構造を知りたい
- HPLC精製で副生成物を単離、高分解能NMRで構造解析します



➢ 光学活性候補化合物を取得して迅速に研究を進めたい
- キラル分析条件を設定して光学純度を確認します
- HPLC光学分割で光学活性体を取得します (数 mg ～ 数 g)
- ジアステレオマー塩分割法を構築してkgスケール製造も可能な光学活性体の調製法を構築します
- X線構造解析でeutomerの絶対配置を決定します

➢ 化合物の純度を確認したい
- HPLC絶対検量線法で定量分析を行います
- 定量NMRを活用して標品の準備が困難な化合物の定量分析を行います



Copyright © 2022 Axcelead Drug Discovery Partners Inc. All Rights Reserved.
Not for circulation to third parties without Axcelead's permission.

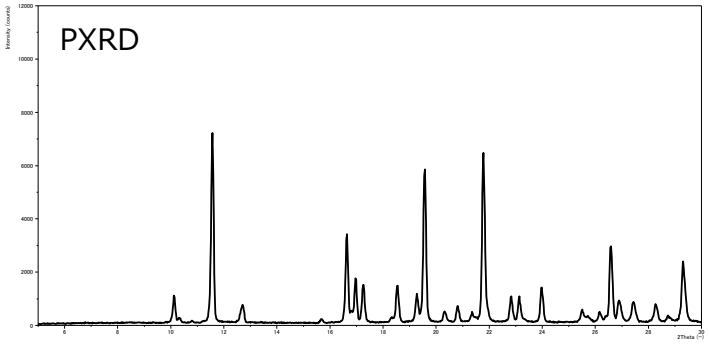
分析化学グループのサービス

■ 医薬品化学研究の様々なニーズにお応えします

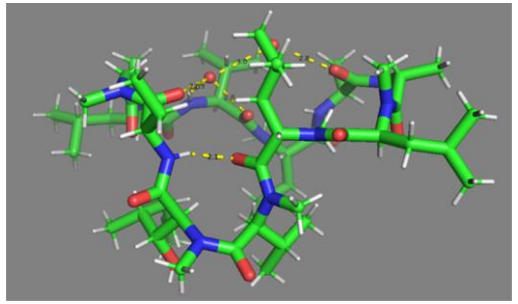
➢ 低分子・中分子医薬品の高純度品 (精製品) を取得したい
- 様々なHPLC条件 (順相、逆相、逆相イオンペア、イオン交換、HILIC条件) で精製品を提供します

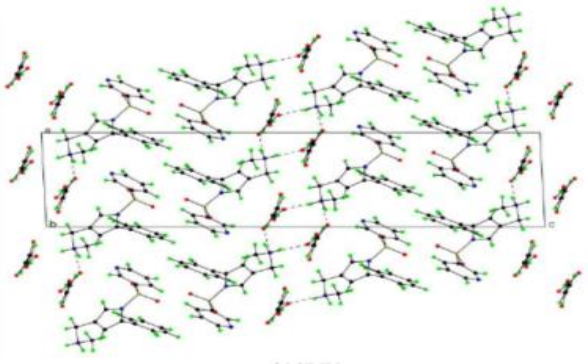
➢ 結晶を取得したい、結晶の溶解性を改善したい
- 迅速に約100条件をスクリーニングして結晶化を検討します (サンプル量：~50 mg)
- 無機/有機酸を用いて造塩結晶化を検討します
- 多形検討を行い粉末X線回折測定 (PXRD測定) で多形を確認します*
- 株式会社 創晶様と連携して結晶化に導きます*

  *弊社 物性グループとの連携メニューです



➢ 結晶構造を確認したい
- X線構造解析で結晶水・カウンターイオンの存在比を推定します
- X線構造解析で分子内水素結合情報を提供します

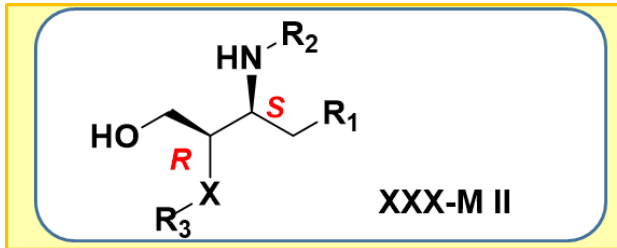




Copyright © 2022 Axcelead Drug Discovery Partners Inc. All Rights Reserved.
Not for circulation to third parties without Axcelead's permission.

分析化学グループのサービス

■ 医薬品化学研究の様々なニーズにお応えします (分析メニューを活用した代謝物合成の例)



目的：(1*R*, 2*S*)-XXX-MIIの合成

・4つの異性体から (1*R*, 2*S*) のみを合成
・旋光度やchiral HPLCの保持時間情報は無し

① 4種のジアステレオマー混合物中間体 (**1**) を合成

② *cis*と*trans*体をHPLC分取

③ NMR構造解析で*cis*-ジアステレオマー (**1'**) を特定

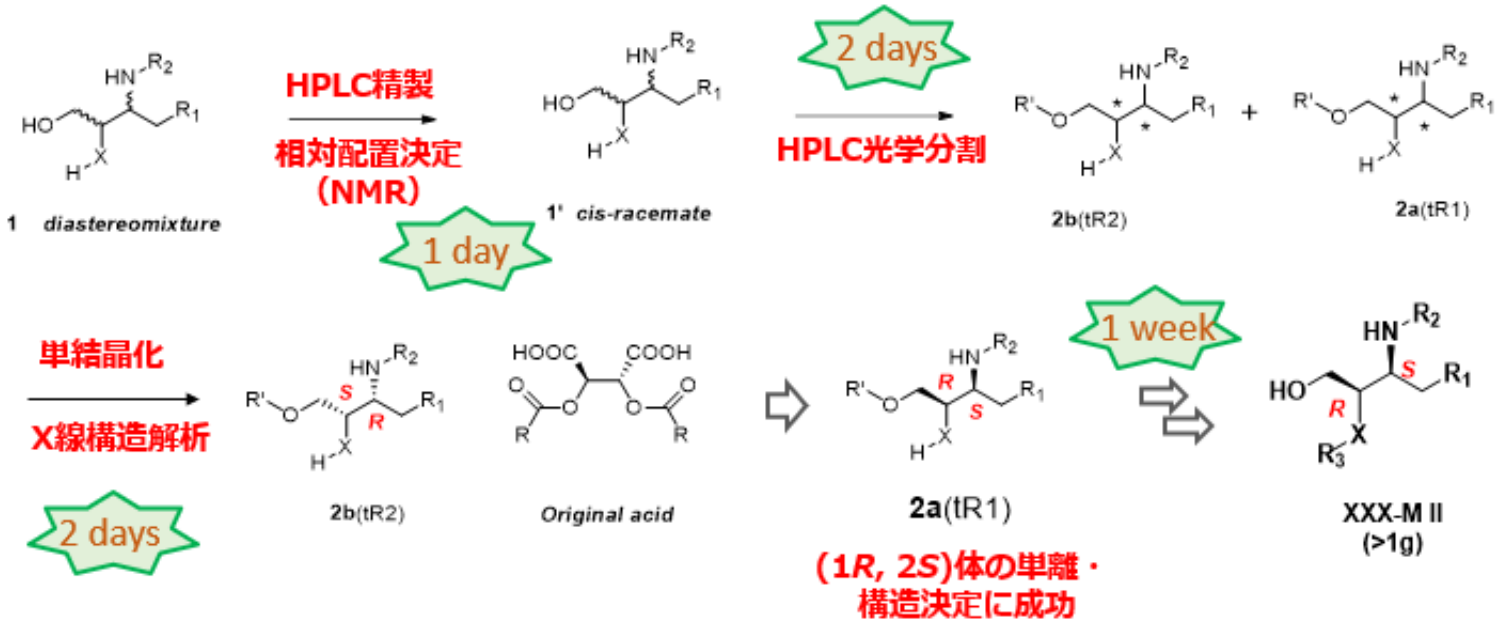
④ *cis-racemate*の光学分割

⑤ 造塩単結晶化 (**2b**)

⑥ 単結晶X線構造解析

⑦ eutomer中間体の特定 (**2a**(tR1))

⑧ 目的代謝物への誘導 (XXX-MII >1 g合成)



様々な作業を必要としながら、4週間で完了 (予備検討、再合成込み)
豊富な機能を有するAxcelead DDPだからこそ実現できるスピーディなOne stop serviceです

Copyright © 2022 Axcelead Drug Discovery Partners Inc. All Rights Reserved.
Not for circulation to third parties without Axcelead's permission.

分析化学グループのサービスをYouTubeでもご紹介しています！

構造解析・HPLC光学分割・精製等、分析化学のソリューションのご紹介

創薬合成研究を加速するNMR構造解析サービスのご紹介

担当者が紹介！単結晶作製から提供するX線構造解析サービス

HPLC分析、精製サービスで創薬合成研究を加速します！

AXCELEAD Drug Discovery Partners