

BioavailabilityDesignMini

BioavailabilityDesignMini は、薬物の経口吸収率を in vitro のデータから予測するソフトウェアです。

1. 使い方はとても簡単：エクセルベースのソフトウェア（マクロ）です。
2. 信頼できる予測精度：200以上の臨床経口吸収データで予測性が検証されています。
3. 計算過程は全表示：計算が Black Box になりません。
4. フレキシブル：各理論式は、エクセル関数として個別に利用することが可能です。
5. スピード：テーブルを用いた一括計算が可能です。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P		
1	Compound ID				Physiological data				Intermediate Parameters				Results					
2	Compound ID				Stomach				Stomach				Fa via stomach dissolution					
3	Input data				pH	1.8			Solubility				Fa				0.586	
4	Basic PhysChem Data				VGI	25			f0	0.000				Fa via intestinal dissolution				
5	MW (free) req.	400		Tst	0.240449			Sdissolv	485.82		mg/mL	Fa				0.156		
6	ABN req.	B		Small intestine				Do	0.00				Total Fa					
7	pKa	8		PE	3			Dissolution				Fa				0.742		
8	logP	3		VE	10			Surface pH	3.69				Other values					
9	m.p.	250 °C		RGI	1.5			Surface f0	0.00005				Type	SL-U				
10	Solubility				DF	1.7			Ssurface	6.258		mg/mL	Tex	1.28				
11	Blank buffer	0.01 mg/mL		VGI	190 mL			kdiss	3.246		1/min	Sn	0.652					
12	Blank buffer pH	6.5		Bile acid	3 mM			Fd	0.979									
13	SIF	0.02 mg/mL		pH bulk	6.5			Small intestine										
14	SIF pH	6.5		pH mcl	6.5			Solubility										
15	SIF Bile conc	3 mM		Tsi	3.5 hours			f0	0.031									
16	In vitro Permeability				htot	0.033 cm			fmono	0.500								
17	Papp	10.00 10 ⁻⁶ cm ² /sec		Pwc	0.000023 cm/sec			Sdissolv	0.020		mg/mL							
18	Membrane type	Caco-2		Cpd	2.2			Do	16.0									
19	pH	6.50		Rmucus	2.9 um			Dissolution										
20	Dose/particle size				Rpara	8.46 MW based			Surface pH	6.5								
21	Dose	100 mg		ChargePara	2.39 mV			Surface f0	0.031									
22	d50	50 um		Qh	21 mL/min/kg			Surface fmono	0.500									
23	Volume	250 mL		BW	70.00 kg			Ssurface	0.020		mg/mL							
24	Species/ Food/Gastric pH								DeffNBE	3.3E-06		cm ² /s						
25	Species	Human						kdiss	0.005				1/min					
26	State	Fasted						Dn	1.1									
27	Gastric pH	Normal						Particle growth										
28	Intrinsic Parameters								kprecip	0.0296373		1/min						
29	Dmono	Calculated	6.56E-06 cm ² /s						kperm	0.044191619				1/min				
30	S0	Experiment	3.07E-04 mg/mL						Permeation									
31	Km	Experiment	1.45E+05						f0	0.031								
32	Ptrans0	logPoct	4.71E-03 cm/s						fmono	0.500								
33									DeffUWL	3.5E-06		cm ² /s						
34									heff	0.0327				cm				
35									PUWL	1.3E-04				cm/s				
36									Ptrans	1.4E-04				cm/s				
37									Ppara	1.6E-07				cm/s				
38									Pep	1.4E-04				cm/s				
39									Para%	0.1								
40									Pep'	7.2E-04				cm/s				
41									Peff	3.3E-04				cm/s				
42									kperm	0.0447				1/min				
43									Pn	9.4								

BioavailabilityDesignMini は、本分野の第一人者である菅野清彦博士（元ファイザー Associate research fellow）が開発した経口吸収率予測に関する理論を、ソフトウェアとして提供する為が開発されました。本ソフトウェアに用いられている理論式および生理学的データは、全て下記の書籍中に、詳しく説明されております。

Kiyohiko Sugano

Biopharmaceutics Modeling and Simulations: Theory, Practice, Methods, and Applications. 2012, Wiley.

BioavailabilityDesign

〒261-8501 千葉県千葉市美浜区中瀬 1 - 3 幕張テクノガーデン CB 棟 3階 MBP

http://www.bioavailabilitydesign.com E-mail: support@bioavailabilitydesign.com