

AIメソッド検索・生成サービス

Methodintelligence for LC



Methodintelligence for LC

化合物検索

Compound: Acetaminophen
Molecular formula: N-(4-hydroxyphenyl)acetamide
Molecular weight: 151.16
pKa: 9.38
logP: 0.5
SMILES: CC(=O)Nc1ccc(O)cc1
PubChem Identifier: CID 1983

次の分析条件が得られました。

分析条件

Column: ACQUITY UPLC BEH C18 (2)
Mobile phase: A: 0.1% aqueous acid in water, B: acetonitrile
Time Program: 0 min 1% (B) min → 1% (B) min → 1% (B) min → 5% (B) min → 5% (B) min → 1% (B) min → 1% (B) min
Buffer: 0.1% (B) min → 1% (B) min → 1% (B) min → 5% (B) min → 5% (B) min → 1% (B) min → 1% (B) min
pH: 2.5

分析結果

Peak: 1.000
Retention time: 1.000 min
Height: 1000000
Area: 1000000
Width: 0.100 min
Height: 1000000
Area: 1000000
Width: 0.100 min

Methodintelligence for LC

サブミット中のタスク

タスク名: 1.000
タスクID: 1.000
タスクステータス: 実行中

タスク詳細

ID	化合物	溶媒	移動相	流速	検出器	分析時間
1.000	Acetaminophen	0.1% aqueous acid in water	acetonitrile	0.1 mL/min	UV-210	1.000 min
2.000	Acetaminophen	0.1% aqueous acid in water	acetonitrile	0.1 mL/min	UV-210	1.000 min
3.000	Acetaminophen	0.1% aqueous acid in water	acetonitrile	0.1 mL/min	UV-210	1.000 min

Methodintelligence™ for LC



LCの初期分析条件をAIで自動生成 文献情報の検索・解析時間を大幅に削減します

LCで初めて扱う化合物を分析する際は、条件検討の出発点となる初期分析条件の設定が極めて重要です。従来の初期分析条件の検討作業は、分析対象化合物に適合する文献を見つけるための調査に多くの時間が必要でした。また、複数の文献の

精査や条件比較も複雑で、高い専門知識が必要という課題がありました。Methodintelligence for LCは、AIが島津の分析技術の知見やWeb上の公知論文を解析し、適切な初期分析メソッドを自動生成する機能によってこれらの課題を解決します。^{※1}

※1 特許出願済み

AIメソッド生成を実現した3つの技術的ポイント

Methodintelligence は島津の分析技術の知見を利用することで、高精度なAIメソッド生成を実現しています。



01 ケミストの思考を 反映した生成 AI

ケミストのナレッジを収集し生成AIに活用することで専門性を持った人間のような思考を実現^{※2}
生成AIの性能を引き上げ、回答の品質を向上



02 AIエージェントによる 条件検討の自動化

生成AIを使用したAIエージェントが文献検索・Web検索・条件検討を自動で行い、迅速に適切な分析条件を提案



03 島津や公知論文で 実績のあるメソッドを参照

確かな情報源として島津アプリケーションニュースや、Web上の公知論文^{※3}を参照することで回答精度を向上

※2 AIエージェント

※3 商用利用可能な論文のみ参照します

Methodintelligence for LC

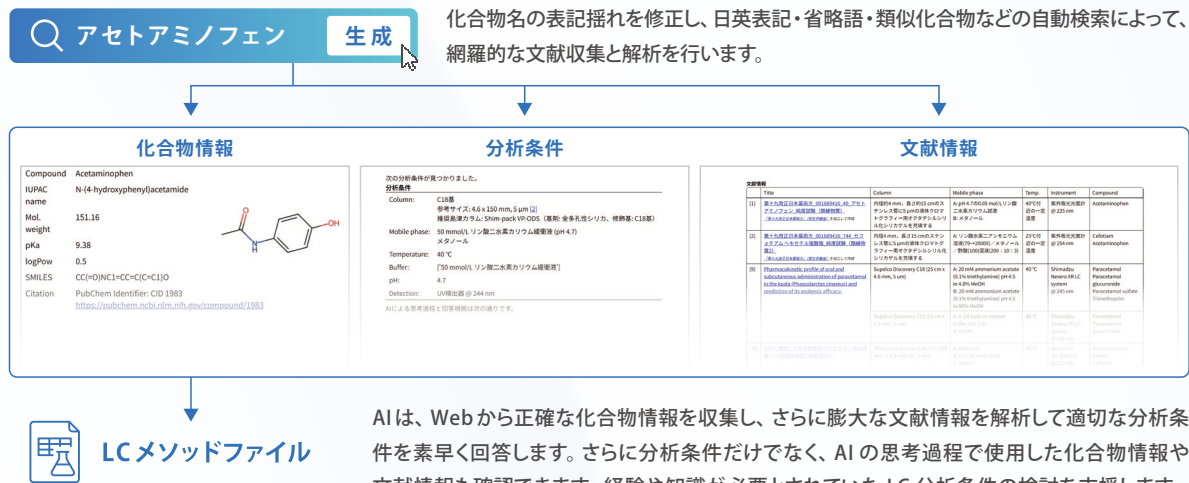


ANALYTICAL
INTELLIGENCE

Analytical Intelligence™は、島津製作所が提案する分析機器の新しい概念です。システムやソフトウェアが、熟練技術者と同じように操作を行い、状態・結果の良し悪しを自動で判断し、ユーザーへのフィードバックやトラブルの解決を行います。また、分析機器に対する知識や経験の差を補完し、データの信頼性を確保します。

Methodintelligence for LCの特長

01 化合物名を入力するだけで、適切な分析条件を迅速に提供



02 文献情報の収集・解析にかかる時間を大幅削減

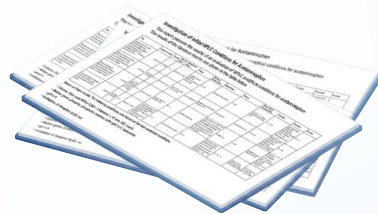
AIと共に情報収集

4000万件

見落としの少ない検索と
文献を横断したAI解析が可能



文献情報 / 分析条件の
一覧表を生成



一覧表はCSV形式で出力でき、社内資料
やレポート作成にそのまま活用できます。

4000万件超の文献の中から検索対象の化合物と関連性の高い文献を素早く入手できます。文献に記載された分析条件は自動抽出され、複数文献の比較や横断解析に適した形式で一覧化されます。これにより、手作業での情報収集を自動化し、業務の生産性向上を支援します。

03 分析条件の検討過程を残して知識継承



知識の蓄積と継承



AIが提案した分析条件について記録を残すことができます。また、分析条件や記録は検討過程としてクラウドのデータベースに安全に残すことが可能なため、個々の経験や知見が失われることなく、いつでも検討過程を参照できます。なお、本サービス

に入力した内容は、AIの学習データとして利用されませんので、機密性の高い研究データや未発表の知見も安心して入力いただけます。こうした仕組みにより、初期分析条件の検討で試行錯誤を減らし、研究開発の加速と分析の品質改善を支援します。

動作環境

OS	Microsoft Windows® 11 Pro 64bit
ブラウザ	Microsoft Edge® 最新版

Web サービスとしてご利用いただけます。

MethodIntelligenceおよびAnalytical Intelligenceは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。
Windowsは、米国Microsoft Corporationの米国およびその他の国における登録商標または商標です。
Microsoft Edgeは、米国Microsoft Corporationの米国およびその他の国における登録商標または商標です。

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。
なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。
本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証等を受けておりません。
治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。
トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。
外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

株式会社 島津製作所

分析計測事業部

604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

製品情報



価格お問合せ



東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631
(大学担当) (03) 3219-5616
(会社担当) (03) 3219-5622

関西支社 (06) 4797-7230
札幌支店 (011) 700-6605
東北支店 (022) 221-6231
郡山営業所 (024) 939-3790

つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511
(会社担当) (029) 851-8515

北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095
(会社担当) (048) 646-0081

横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106
(会社担当) (045) 311-4615

静岡支店 (054) 285-0124

名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521
(会社担当) (052) 565-7531

京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604
(会社担当) (075) 823-1603

神戸支店 (078) 331-9665
岡山営業所 (086) 221-2511

四国支店 (087) 823-6623

広島支店 (082) 236-9652
九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332
(会社担当) (092) 283-3334

島津コールセンター ☎ 0120-131691
(操作・分析に関する相談窓口) IP電話等: (075) 813-1691