



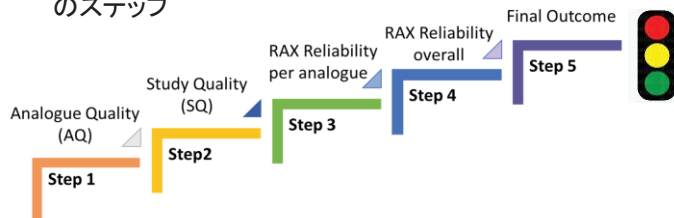
# ToxGPS® Read-Across

関連性、信頼性、一貫性、再現性に優れたリードアクロス解析

**ToxGPS® Read-Across** は、リードアクロス解析を行うためのインタラクティブなワークフローです。このワークフローには、分子構造、物理化学、生物学、毒性データなど、さまざまなタイプの実験データや *in silico* 情報を入力することができます。ユーザーは、利用可能なすべての情報を列挙し、不確実性の推定値と証拠の重み付け(WOE)の結果を得るためのデータを選択することができます。ワークフローは、リードアクロスにおける一貫性、再現性、透明性のある意思決定手順をサポートします。

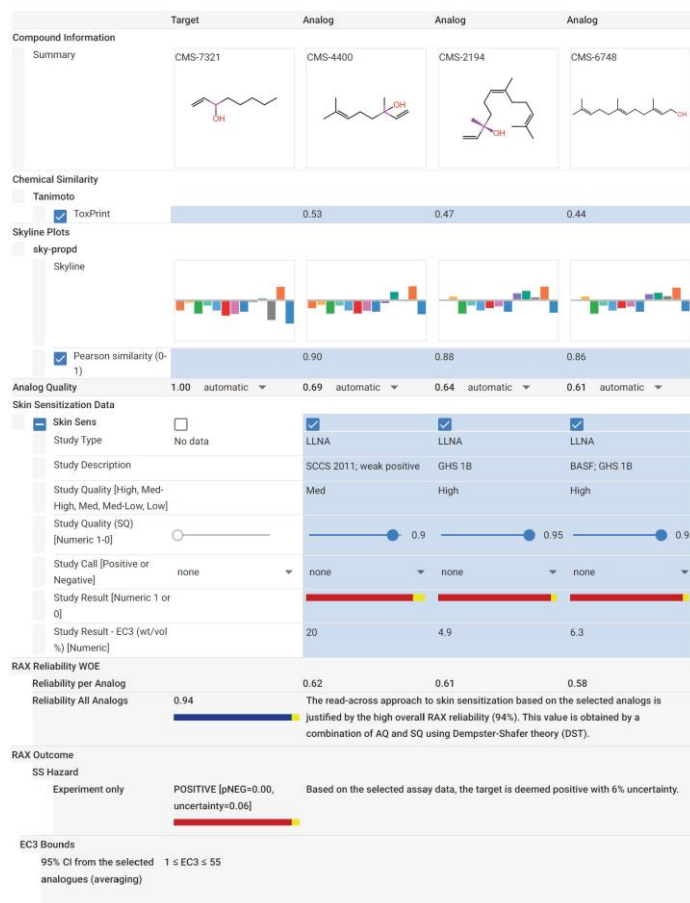
## ワークフローの戦略

- 定量的なリードアクロス評価を完了するための 5 つのステップ



## 主な機能

- 化学種の同定
  - 類似体、代謝物、互変異性体 など
- 化学構造に基づく類似性
  - 複数のフィンガープリント (topological, circular, ToxPrints, liver or skin metabolic reactivity)
  - 複数の評価 (Tanimoto, Dice など)
- 物理化学的特性に基づく類似性
  - 分子特性
  - 物理化学的特性
  - 量子力学エネルギー論
- 生物学に基づく類似性
  - Tox21/CAST assay vectors
  - ADME データ
- ユーザ定義の類似性 (データ・アップロード)
- アナログ構造品質 (AQ) とデータ品質 (SQ) によって決定されるリードアクロスの信頼性
- 選択された証拠の組み合わせによる全体的な評価: 不確実性を伴うアウトカムの推定



\*Interactive templates for assessment of skin sensitization, carcinogenicity, genetic & target organ toxicity as well as Analog Quality and user-defined Weight of Evidence combination

- 皮膚感作性の定量的リードアクロス評価を完了するための 5 つのステップ
- リードアクロスの信頼性 (High, 0.94)、LLNA のアウトカムは Positive: EC3 95%CI (3-55 wt/vol%)

● 詳細につきましては、お問い合わせください。● 記載の商品名は各社の商標または登録商標です。● 本カタログの記載内容は予告なく変更される場合があります。



Molecular Networks-Altamira社日本代理店

株式会社モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀

Phone: 03-3553-8030 FAX: 03-3553-8031 E-mail: sales@molsis.co.jp URL: <https://www.molsis.co.jp/>

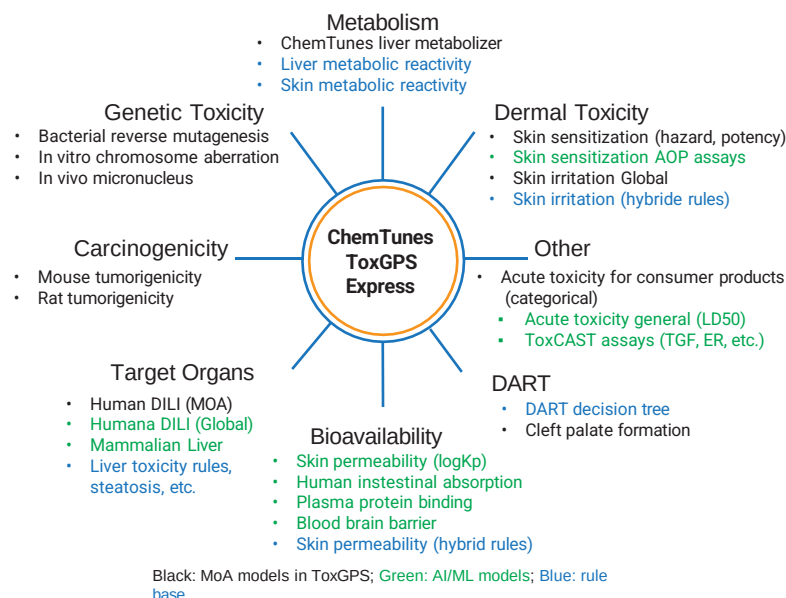


# ToxGPS In Silico Tools

化学物質の安全性評価をサポートする多彩なツール

## 毒性予測

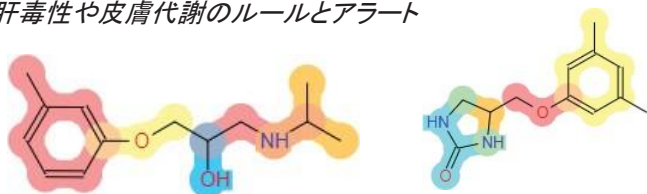
- ヒト健康関連エンドポイント



- MoAモデルとルールベースを組み合わせる確率論的アウトカムを生み出す証拠の重み付けアプローチ
- EFSA、US FDA、NIHS Japanとの共同研究、および顧客サイトでの検証プロジェクト

## Chemotype プロファイル

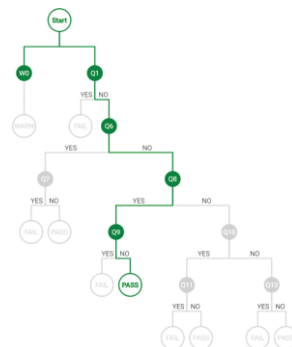
- 化合物のプロファイリング、グループ化、および分類による、構造的、生物学的、および代謝的類似性の評価
- 広範囲なプロファイリング (ToxPrint、化学反応性、毒性、および代謝)
- 例: DNA/タンパク質との結合、肝毒性や皮膚代謝のルールとアラート



ToxGPS® In Silico Toolsは、化合物の毒性のin silico 評価に不可欠な、物理化学的特性の計算、QSAR モデル、主要なヒト健康関連および規制関連の毒性エンドポイントの予測 (構造・特性とルールベース)、ケモタイプ・プロファイラー (有害作用および作用機作)、TTC 分析ワークフローなどのツールを提供します。

## TTC 解析

- 化学ドメインと毒性学懸念でのフィルター
- Cramer分類スキーム
  - オリジナル、拡張、修正Cramer 分類によるToxTreeの実装
- Munro 及び 香粧品の非がん EDI 閾値
- インタラクティブなツリー表現



## Molecular Properties

- 分子および物理化学的特性 - 全分子特性 (22) および形状記述子 (8)
- 量子力学的記述子 (4) - 生成熱、HOMO、LUMO、HOMO/LUMO ギャップ
- 特性値の類似性を評価するためのスカイラインプロットによるプロファイル表示



● 詳細につきましては、お問い合わせください。● 記載の商品名は各社の商標または登録商標です。● 本カタログの記載内容は予告なく変更される場合があります。



Molecular Networks-Altamira社日本代理店

株式会社モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀

Phone: 03-3553-8030 FAX: 03-3553-8031 E-mail: sales@molsis.co.jp URL: <https://www.molsis.co.jp/>