



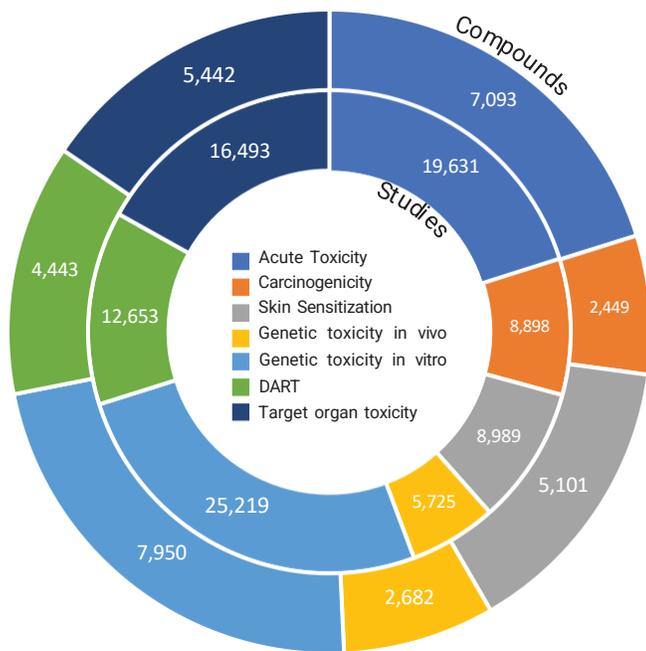
化学物質の安全性評価のための専門家レビューによる毒性データ

ChemTunes は、化学物質の安全性とリスク評価を促進しサポートする情報化学プラットフォームです。in vivo および in vitro の毒性・安全性評価や代謝データとともに化合物データの保管・管理・検索を行えます。

ChemTunes は、安全性・リスク評価の分野に従事する毒性学研究者のニーズに応じて、化合物と毒性データを組合わせて関連情報を検索できる、使いやすいユーザーインターフェイスを提供します。

データベースの統計

毒性データベース



ADME

- PBK データ: 食品、医薬品、農薬の PK/TK/TD データ
- 代謝物: 医薬品と農薬の代謝物に関する ADMET データ
- ADE: in vivo と in vitro の経口および経皮吸収と透過性
- データソース: ECHA, IUCLID-6, SCCS, 公開文献, US FDA, EFSA opinions

特長

- 10万件以上の化学物質
- 128 エンドポイントに関する12万件以上の毒性試験
- 食品、医薬品、化粧品、工業用化合物、農薬等多様なケミカルスペースと規制用途の種類

利用可能なデータベース

毒性

- 投与レベルで示すヒトの健康関連エンドポイント
- エンドポイント: 急性毒性、発がん性、皮膚毒性(皮膚刺激性、感作性)、発生・生殖、神経毒性
- データソース: ECHA, EFSA, SCCS, US CIR, NTP, US EPA (IRIS, ToxRefDB), US FDA (CDER, CFSAN), CPDB, IARC, HESS Japan, IUCLID-6, 文献, Fraunhofer ITEM RepDose (オプシオン) など

安全性評価

- 安全性評価の結果:
 - POD (Point of Departure): NO(A)EL/LO(A)EL, LD50, BMD10/TD50, などの毒性指標、安全性の判定またはカテゴリ
 - HBGV (Health-Based Guidance Value) リスクガイドライン: MOS、MOE、RfD、TDI、ADI値、および重要な試験やその他のメタ情報
- データソース: EFSA, SCCS, ECHA, US EPA, US FDA, JECFA/WHO, HESS Japan, IARC, CPDB など

● 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 ジョハ丁堀

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

(2022/12/01)



ChemTunes Metabolism Database

外因性および内因性の代謝経路

ChemTunes Metabolism Database は、外因性および内因性の代謝情報をもつ化合物の生体内変化のデータベースです。外因性代謝（生体異物）に関するデータには、文献から収集された薬物および薬物様分子のヒト肝臓変換、ならびに EFSA の意見書から収集された実験室および家畜および霊長類における殺虫剤の *in vivo/in vitro* 代謝研究が含まれます。

内因性代謝に関するデータにより、「生化学的パスウェイ」のウォールチャートおよび文献データから得られた、代謝変換および細胞制御にアクセスすることができます。

システムの特長

- 毒性データ (ChemTunes Toxicity) と代謝変換情報を独自に結合
- 専門家の手作業による品質管理
- 外因性代謝
 - ・ 親化合物/代謝物の関係に関する情報
 - ・ 主要代謝物と副代謝物への分類
 - ・ 最大 5 レベルの代謝分解
- 内因性代謝
 - ・ 酵素(名称とEC番号)と経路(名称)に関する情報
- 立体化学情報を含むコネクションテーブルで保存された分子

データベースの特長

外因性代謝

- 医薬品、農薬、工業薬品
- 500 の親分子と5,000以上の代謝物からなる、5,500 以上の化学構造
- 2,800 以上の化学反応
- 140 以上の反応タイプ

内因性代謝

- 原核生物、動物、植物および酵母の4種、および、一般的なパスウェイ
- 14,500 以上の化学構造式
- 3,900 以上の化学反応
- 640 パスウェイ

応用分野

- 代謝に関連した毒性の特定
- **ChemTunes Metabolizer** により予測された生体異物の変化の検証
- 化学物質の安全性とリスク評価のための新しいアプローチ方法の支援



● 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/>

(2022/12/01)