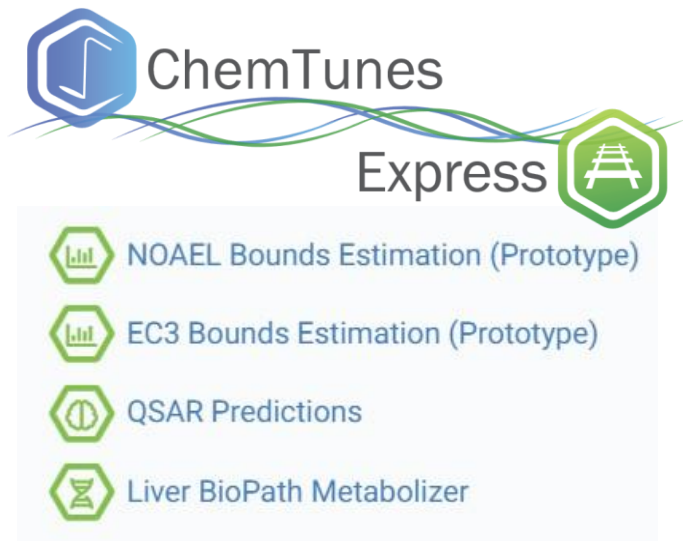




ChemTunes Express

毒性、安全性および代謝の予測

ChemTunes Express は、化学物質の安全性研究およびスクリーニングを支援するための予測ツールセットです。この予測ツールには、NOAEL値とEC3値の区間推定、AIを利用した機械学習モデルによる毒性とバイオアベイラビリティのエンドポイントの予測、および、ヒト肝臓代謝によるルールベースの代謝予測が含まれており、各予測モデルは最適化されています。

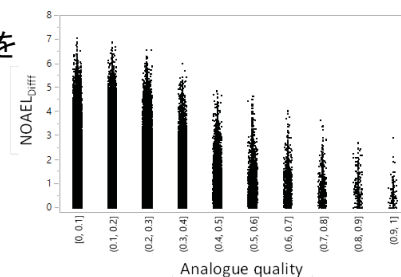


ADE Prediction

- 皮膚透過性
 - さまざまな化合物空間からのヒト *in vitro* データ
- ヒトの経口(腸)吸収
 - 経口投与医薬品、化粧品、食品関連化学物質のヒト *in vivo* 試験
- ヒト血漿タンパク質結合
 - NIEHS の薬物データセットを用いた平衡透析研究のヒト *in vitro* 試験
- 血液脳関門透過性
 - 主に静脈内注射によるラット *in vivo* 試験

NOAELとEC3の区間推定

- 高度にキュレートされた NOAEL および EC3 データベースを利用した、独自の革新的なケモインフォマティクス・アプローチ
- データベース
 - NOAEL: RDT および DART 研究による 2,000 以上の NOAEL 値
 - EC3: LLNA 研究からによる 500以上の EC3値
- 区間推定
 - 分位点モデリング
 - 最近傍法 (Nearest neighbor approach)



Do Similar Structures Have Similar No Observed Adverse Effect Level (NOAEL) Values? Exploring Chemoinformatics Approaches for Estimating NOAEL Bounds and Uncertainties

Chihai Yang*, James F. Rathman, Tomasz Magdziarz, Aleksandra Mostrag, Sunil Kulkarni, and Tara S. Barton-Maclaren *Chem. Res. Toxicol.* 2021, 34, 616–633

毒性の予測

- 皮膚刺激性
 - Draize試験モデル
- ヒト薬物性肝障害
 - 市販薬データおよび文献データ
- 非臨床薬物性肝障害

● 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/>

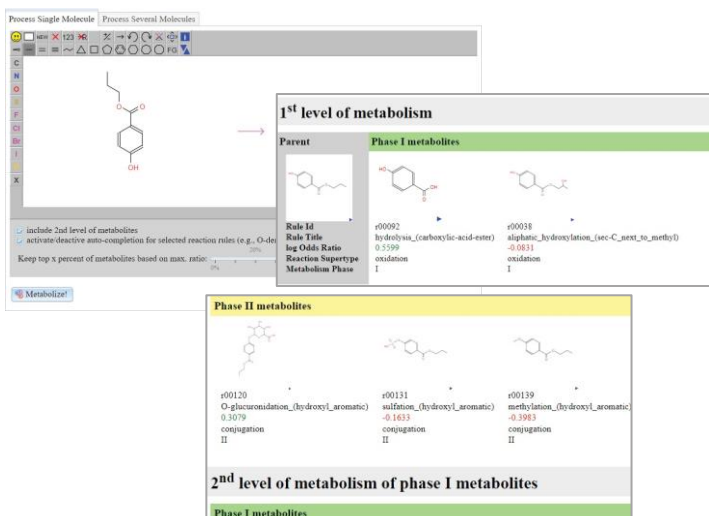
(2022/12/01)



ChemTunes Metabolizer

ヒト肝細胞での代謝変換予測

ChemTunes Metabolizer は、ヒト肝臓による代謝運命に従って化合物をプロファイリングすることで、毒性および解毒経路の特定を支援します。生体内変化は、140を超える反応タイプに基づく知識ベースに保存されており、ヒト肝代謝のフェーズ I および II における最も重要な反応タイプをカバーしています。



代謝物の生成

代謝物は系統的に生成され、大規模な代謝反応データベースから得られた最尤推定量に従って優先順位が付けられ、さらにMN-AM社独自のin vitroヒト肝細胞データベースを使用して最適化されます。生成された代謝物の潜在的な毒性は、ChemTunesプラットフォームで利用可能なモデルを適用して推定することができます。

特長

- 反応ルールの適用による代謝物の生成のためのルールベース・システム
- 代謝物の発生の可能性に応じた優先順位付け (PPV およびオッズ比)
- 親化合物と生成された代謝物の化学構造の可視化
- 分子構造入力オプション:
 - バッチファイルアップロード
 - 分子エディターからの単一分子入力
- 下流のアプリケーションで利用するために生成された代謝産物の出力
- 分子構造の入力と出力のための標準ファイル形式のサポート (Mol, SD, SMILES など)

Transformation Types

フェーズ I 機能化反応

- 開裂
- 加水分解
- ヒドロキシ化
- ラクタム/ラクトン生成
- 酸化
- 転位
- 還元 など

フェーズ II 抱合反応

- アシル化
- グルクロン酸抱合
- 糖化
- メチル化
- リン酸化
- 硫酸化 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)