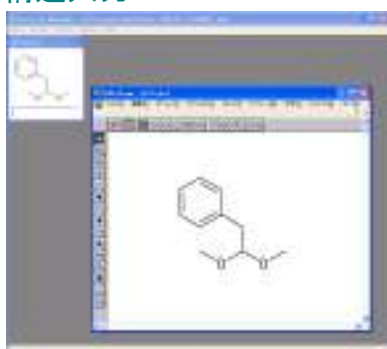


Derek for Windows Version 12

● 構造入力



Derek for Windows は化合物の構造からその毒性を予測する知識ベースのエキスパートシステムです。Derek for Windowsは他の毒性予測プログラムの様に、統計解析的な手法を用いた定量的毒性予測ではなく、多くの知見から得られた部分構造毒性相関の経験則を定義した知識ベースにより、定性的毒性予測を行います。化合物の構造をISIS/DrawまたはMDL Mol・SDファイルからインポートすることで、容易な操作により毒性予測が可能です。同時に、その毒性予測の根拠になった構造部位をカラーで提示します。また、構造毒性相関に関するリファレンスや既知の例証化合物も参照することができます。

● 毒性予測と毒性予測ルールの参照

The screenshot shows a 'Result' window with a chemical structure and a 'LHASA PREDICTIONS' list including Chromosome damage, Genotoxicity, Mutagenicity, and Skin sensitisation. A separate window shows a rule for alert number 306, 'Alkyl aldehyde or ester', with a chemical structure and a table of parameters: R1, R2, R3, R4.

● 知識ベース

Derek for Windowsで用いられる知識ベースは、毒性のある化合物から共通のルールを導き出し作成されています。知識ベースの内容は、ユーザに公開されており、現在637種のアラートが収録されています。知識ベースの作成には、Collaborative グループのメンバーから提供された情報やCAS, Toxicology Journal等の文献情報が用いられています。作成されたルールの妥当性はCollaborative グループのメンバー、並びにLhasa社よりチェックされており、一部のアラートについては評価データを参照することができます。

現在、Derekの知識ベースは下記に示すような重要な毒性をカバーしております。

- Mutagenicity
- Carcinogenicity
- Chromosome damage
- Genotoxicity
- Skin sensitisation
- Irritation
- Hepatotoxicity
- HERG channel inhibition
- Teratogenicity
- Thyroid toxicity
- Respiratory sensitisation
- その他

● アラートの作成

The screenshot shows a 'New Alert' window with a chemical structure of an ester and a 'Rule Definition' window where a rule is being created. The rule definition includes a description, a chemical structure, and a list of parameters: R1 = C, H.

● 自社知識ベースの構築

知識ベースの構築にはKnowledge base editorというツールが用意されており、ユーザは独自のルールを作成することが可能です。

● 規制対策としての利用実績

不純物(特に遺伝毒性)の毒性評価に関して、FDA等の規制当局へ参考データとして提出されているという実績があります。特にEMEAのガイドラインではDerekによる予測結果が陰性であった場合、不純物の遺伝毒性試験が必要無くなることが明記されています。また、合成経路の検討にも活用されています。

CTCラボラトリーシステムズ株式会社

〒154-0012東京都世田谷区駒沢1-16-7 中村ビル5F TEL: 03-5712-8350
 〒532-0003大阪府大阪市淀川区宮原3-4-30 ニッセイ新大阪ビル19F TEL: 06-6151-8889
 Mail: biosales@ctc-g.co.jp