



変異原性リスク評価プラットフォーム **Detoxie for ICH M7[®]**

Read-acrossに基づく化合物の毒性評価

InsilicAll社のMulti-Descriptor Read Across (MuDRA) テクノロジーでは、様々な分子記述子に基づいて既知の化合物との類似性を検証し、分子構造的、生物学的および毒性学的類似性に関する包括的な評価を提供します。

3種類の独自のデータベース

17,000種類を超える化合物の情報を収めたInsilicAll社独自の3つのデータベース (Hydra[®]、ElectroShapeX[®]、BiotechWay[®]) を参照しながら、さまざまな観点に基づいたリスク評価を簡単に行うことができます。

構造式エディターを統合

Detoxie for ICH M7[®]には構造式エディターが搭載されており、外部のサードパーティの化学構造エディターにリンクする必要がなくなります。

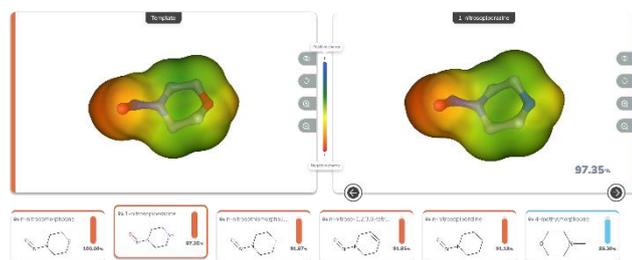
Hydra[®]

- 高度な部分構造パターン認識
- 正確な物理化学的および構造的特性の予測
- 最先端の量子力学 (QM) 特性予測
- 高度な変異原性構造アラート
- ビジュアライゼーションとレポート作成



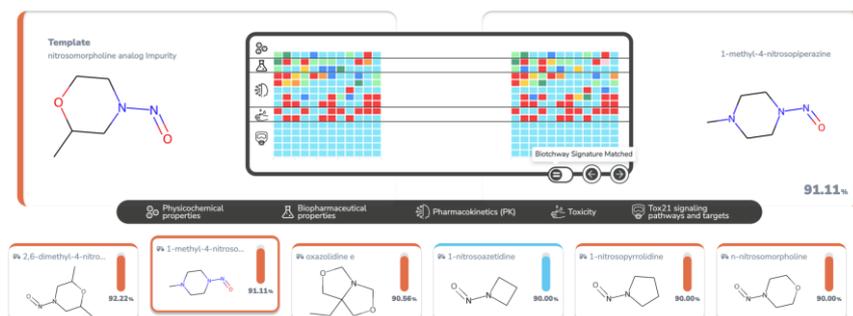
ElectroShapeX[®]

- 3D配座異性体および静電ポテンシャルの分析
- 幾何学的、静電的的特性による化合物の分類
- Carbo類似度指数の算出
- 既知の毒性物質との類似性比較



BiotechWay[®]

- LogP、LogD、極性表面積 (PSA) などの物理化学的特性予測
- 透過性、バイオアベイラビリティ、タンパク質結合性などの薬剤特性予測
- ラットおよびヒトにおける半減期、クリアランス、分布量、代謝などの薬物動態特性予測
- 変異原性、発がん性、生殖毒性などの毒性エンドポイント予測
- Tox21シグナル伝達経路および標的パネルからの56のin vitro毒性エンドポイント予測



フィルジェン 株式会社

【お問い合わせ】 バイオインフォマティクス部

TEL : 052-624-4388 FAX : 052-624-4389

メール : biosupport@filgen.jp URL : <https://filgen.jp/>

Filgen[®]
biosciences & nanosciences

代理店