

Ames変異原性予測ソフトウェア xenoBiotic

地域科学部

特別協力研究員 澤田 敏彦

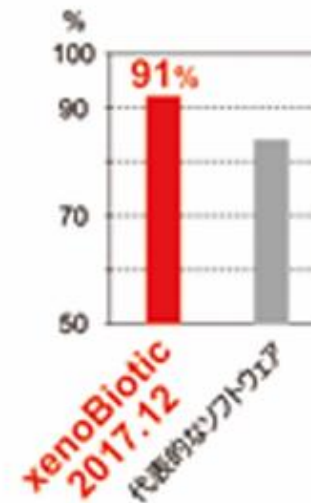


医薬、農薬、動物薬、インク・染料、添加剤等、機能性新規化合物の開発では、「高コストな毒性試験」と「非効率な毒性陰性化の施策」が大きな課題です。私たちは、REACH規則ならびに国内法で規定された毒性指標であるAmes変異原性が化合物の設計図にもとづいて予測できるソフトウェアxenoBioticを提供いたします。xenoBioticの予測正答率は、私たちが調べた限り、既存ソフトのそれよりも高いです。xenoBioticのご利用により、① Ames変異原性試験コストの削減、② Ames変異原性の陰性が高確度で見込まれる化合物設計図に注目した実験の優先順位付けが達成できます。

東海広域5大学ベンチャー起業支援 スタートアップ準備資金(平成30年度開始分)採択、共同研究者:和佐田裕昭(地域科学部 教授)、橋本智裕(地域科学部 准教授)、利部伸三(岐阜大学名誉教授)

特許出願:特願2017-135877(毒性予測方法及びその利用)

農薬724種で評価した
Ames変異原性予測の正答率



xenoBioticの出力例

	Ames変異原性		
	陰性確率 (%)	陽性確率 (%)	判定
<chem>Nc1cc(Cl)cc(Cl)c1</chem>	97	3	陰
<chem>Fc1cc(NC(=O)Nc2cc(F)c(Cl)c(F)c2F)cc(F)c1</chem>	71	29	陰
<chem>Oc1cc(Cl)ccc1Cc2cc(O)ccc2</chem>	26	74	陽