

**CTC**  
 Challenging Tomorrow's Changes

The next generation chemical database

**Vitic**
**Lhasa**  
 Limited

## ● 検索条件の指定

The screenshot shows the Vitic search interface. On the left, there are 'TABLES' and 'TOXICITY' filters. The main area is 'QUERY' with 'SUB' and 'GENETIC TOXICITY IN VITRO' selected. Callouts point to '構造ベース' (Structure-based) and 'テキストベース' (Text-based) options. At the bottom, it shows 'STRUCTURES 16' and 'RECORDS 149'.

Viticは様々なデータソースから約20,500化合物の毒性試験データを収録したデータベースです。化合物構造、毒性エンドポイント、毒性試験の種類、生物種、試験結果(例: Positive/Negative)などを検索条件として、目的のデータを瞬時に探し出し閲覧が可能で、また収録されているデータは、化学、毒物学、薬理学などのさまざまな経歴を持つLhasa社の科学チームによりキュレーションされています。また、毒性予測ソフトウェア Derek Nexusと併用しての自社化合物の毒性リスク評価目的での利用も可能です。Derek Nexusにより、候補化合物構造の中から毒性発現に関与すると想定される部分構造(Toxicophore)を見つけ出し、そのToxicophoreを有する類似した化合物の毒性情報を更にViticにより遡って抽出することで、候補化合物のリスク評価を多面的に行うことができます。

## ● 毒性試験データの表示

The screenshot shows the 'RESULTS' page in Vitic. It displays a table with columns for 'Chemical Name', 'Observation Type', 'Result', and 'LSD'. The table lists data for 'Revefantsipano' at various doses (0, 50, 100, 500, 1000, 2000 ug/30min). Below the table, there are sections for 'Supplementary tables' and 'Dose-Response Data'.

## ● 検索結果レポートの作成

The screenshot shows a detailed report for 'Structure 121-90-4'. It includes a chemical structure, 'Chemical Name', 'Molecular Formula', 'Molecular Weight', and 'Substance ID'. Below this is a table with columns for 'Structure ID', 'Chemical Name', 'Observation Type', 'Result', and 'LSD'. The table lists data for 'Revefantsipano' at various doses.

## ● Vitic 収録毒性エンドポイント

Viticは下記に示すような毒性エンドポイントのデータをカバーしております。

主なエンドポイント	主なデータソース
Genetic Toxicity	ECB (IUCLID), NTP, NCI data 2006 Novartis genotox d+B2ata Sofuni review 1998 Ishidate clastogenicity 1988 CGX data 2005, NIHS Kirkland 2008 paper
HERG	HERG literature
Hepatotoxicity	Hepatotoxicity literature
Repeat Dose Toxicity	ECB (IUCLID), SCCP Opinions NIHS, FDA CDER Pesticide literature, NTP
Skin Sensitization	ECB (IUCLID) Cosmetic Ingredients Review SCCP Opinions NICEATM-ICCVAM
Carcinogenicity	ECB (IUCLID), California EPA Pesticide literature
Developmental Toxicity / Teratogenicity	ECB (IUCLID) FDA CDER/CFSAN
Acute Oral Toxicity	ECB (IUCLID)

## ● Data Sharing Project

当プロジェクトに参加すると、Viticをデータ閲覧のプラットフォームとして、各ユーザ企業様間で毒性試験情報を提供・共有しあい、排他的に閲覧することが可能になります。現在、Excipientsに関するプロジェクトと Intermediatesに関するプロジェクトなどが進められ、それぞれのプロジェクトに対して新たに加入するユーザ企業様も着々と増えてきております。

**CTC**  
 Challenging Tomorrow's Changes

製品お問合せ先

Tel:03-6417-6600 E-mail:ls-marcom@ctc-g.co.jp

**伊藤忠テクノソリューションズ株式会社**

 エンタープライズ事業グループ  
 ライフサイエンス事業部

 〒141-8522 東京都品川区大崎1-2-2 アートヴィレッジ大崎セントラルタワー Tel: 03-6417-6600 Fax: 03-5434-0061 <http://ls.ctc-g.co.jp>