

発がん性スクリーニングにおける遺伝毒性の構造活性相関結果の評価基準
(平成25年度第1回WG後修正版)

発がん性情報、遺伝毒性情報のいずれもない物質については、まず、遺伝毒性の構造活性相関について計算し、その予測結果により試験実施の優先順位を判断することとし、具体的には次のように行う。

1 構造活性相関の計算に使用するプログラム

遺伝毒性の構造活性相関の計算は、各物質について、細菌復帰突然変異試験（エームス試験）に関して、次の3つのプログラムを使用して行う。

- ① Derek Nexus
- ② Case Ultra
- ③ ADMEWORKS

2 構造活性相関予測結果によるエームス試験実施のための優先順位の判断

(1) 第1優先順位

3つのプログラム全てで陽性の予測結果が得られた場合

(2) 第2優先順位

2つのプログラムで陽性の予測結果が得られた場合

3 非遺伝毒性物質の推定 【今後の検討】

3つのプログラム全てで陰性の予測結果が得られた場合には、非遺伝毒性物質であると推定し、非遺伝毒性物質のための発がん性スクリーニング試験の優先候補とする。