

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
24602-86-6	-0.82	27955-94-8	-0.26	32329-20-7	-3.17
24729-96-2	0.11	28217-92-7	-2.59	32388-55-9	-1.16
24781-13-3	-1.90	28305-25-1	-4.17	32588-76-4	-6.95
24794-58-9	-2.99	28434-01-7	-1.32	32634-37-0	-0.18
24800-25-7	-0.37	28588-73-0	-2.85	32647-67-9	-2.42
25036-13-9	-4.47	28664-35-9	-3.43	32687-77-7	-2.09
25103-58-6	-2.46	28701-67-9	-1.24	32813-95-9	-2.45
25104-55-6	-3.37	28908-00-1	-3.55	33174-74-2	-2.32
25265-78-5	-1.72	29066-34-0	-2.58	33513-44-9	-3.92
25339-17-7	-1.93	29091-21-2	-2.25	33820-53-0	-1.57
25360-10-5	-2.88	29171-20-8	-2.09	33878-50-1	-1.74
25378-22-7	-2.45	29239-07-4	-2.53	34086-51-6	-2.55
25485-88-5	-2.13	29329-71-3	-2.73	34131-99-2	-0.88
25677-40-1	-3.38	29350-73-0	-1.76	34285-88-6	-2.53
25812-30-0	-2.30	29387-86-8	-3.94	34451-19-9	-3.16
25899-50-7	-3.87	29548-14-9	-2.55	34644-00-3	-2.97
25973-55-1	-2.01	29606-79-9	-3.44	34644-03-6	-2.97
26171-78-8	-2.29	29799-07-3	-1.50	34686-71-0	-2.02
26294-98-4	-3.89	29911-27-1	-2.02	35044-68-9	-2.67
26377-29-7	-4.11	30076-98-3	-2.67	35203-06-6	-2.77
26401-27-4	-2.03	30113-45-2	-1.71	35203-08-8	-2.48
26444-49-5	-2.03	30484-77-6	-4.06	35250-53-4	-3.53
26446-31-1	-2.44	30499-70-8	-3.41	35270-09-8	-3.93
26489-01-0	-1.70	30558-43-1	-3.67	35274-05-6	-4.25
26538-44-3	-0.31	30574-97-1	-3.97	35448-31-8	-3.19
26748-47-0	-1.65	30845-78-4	-2.62	35958-30-6	-5.88
26760-64-5	-3.73	31375-17-4	-2.00	36267-71-7	-3.67
26915-97-9	-3.30	31529-46-1	-3.05	36306-87-3	-1.74
26999-29-1	-1.81	31582-45-3	-1.94	36362-19-3	-2.09
27043-36-3	-3.38	31618-90-3	-2.08	36431-72-8	-2.05
27126-93-8	-3.53	31879-05-7	-1.67	36438-54-7	-2.91
27375-52-6	-2.94	31983-27-4	-2.70	36687-82-8	-2.80
27458-92-0	-1.62	32046-75-6	-2.60	36861-47-9	-2.42
27776-21-2	-1.82	32210-23-4	-1.97	37161-74-3	-2.96

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
37172-05-7	-2.18	42240-73-3	-2.18	52184-19-7	-2.39
37514-30-0	-1.51	42348-12-9	-3.01	52222-87-4	-1.61
37717-68-3	-1.70	42436-07-7	-2.12	52299-20-4	-3.58
37734-45-5	-3.74	42558-01-0	-1.92	52509-84-9	-2.54
37853-59-1	-2.52	42604-12-6	-1.27	52628-03-2	-3.30
37887-04-0	-3.95	43040-01-3	-3.64	52950-18-2	-2.72
37971-36-1	-4.44	43219-68-7	-2.96	53004-93-6	-1.23
38103-06-9	-1.51	44860-68-6	-2.67	53112-28-0	-2.81
38183-04-9	-2.14	46948-72-5	-3.10	53153-66-5	-3.13
38185-06-7	-3.66	49561-96-8	-3.11	53219-21-9	-2.57
38325-25-6	-2.24	49584-26-1	-3.45	53910-28-4	-2.56
38565-53-6	-2.26	49653-17-0	-2.38	54060-92-3	-0.72
38713-41-6	-3.61	50328-50-2	-2.78	54512-75-3	-3.75
39067-80-6	-3.03	50471-44-8	-2.86	54546-26-8	-2.42
39148-24-8	-3.83	50594-44-0	-1.42	54644-28-9	-3.51
39198-34-0	-1.25	50594-77-9	-2.09	54731-72-5	-2.68
39718-00-8	-3.57	50626-02-3	-2.71	55179-31-2	-1.63
40164-69-0	-2.79	50639-37-7	-2.07	55418-52-5	-2.63
40348-72-9	-2.27	50671-48-2	-1.86	55526-94-8	-1.09
40607-48-5	-2.35	50789-44-1	-2.57	55704-78-4	-2.62
40654-82-8	-2.81	50849-47-3	-1.80	55954-19-3	-0.15
40843-73-0	-2.31	50892-23-4	-3.05	56038-89-2	-2.06
40853-53-0	-2.31	51011-05-3	-3.61	56073-10-0	-0.21
41203-81-0	-0.80	51115-63-0	-2.66	56105-46-5	-1.56
41239-48-9	-2.93	51218-45-2	-2.56	56107-04-1	-1.69
41253-21-8	-4.19	51219-00-2	-2.34	56481-85-7	-3.41
41453-56-9	-2.11	51410-72-1	-3.21	56718-71-9	-2.59
41532-84-7	-2.44	51411-24-6	-0.84	56966-52-0	-3.15
41543-92-4	-2.98	51441-65-7	-3.48	57082-24-3	-2.00
41556-26-7	-0.08	51566-62-2	-2.82	57110-29-9	-2.39
41678-36-8	-1.54	51632-16-7	-2.61	57124-87-5	-3.52
41796-12-7	-1.63	51755-66-9	-2.17	57246-09-0	-1.71
41890-92-0	-1.29	51981-33-0	-2.55	57371-42-3	-1.99
42175-41-7	-1.56	52166-72-0	-4.09	57378-68-4	-2.01

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
57486-68-7	-3.64	65287-04-9	-2.35	68391-39-9	-1.62
57499-57-7	-1.27	65405-68-7	-2.01	68412-48-6	-2.80
57583-54-7	0.26	65505-24-0	-2.81	68459-99-4	-2.51
57648-55-2	-2.24	65505-25-1	-2.22	68480-17-1	-2.02
57943-67-6	-1.03	65620-50-0	-2.13	68515-48-0	-1.67
58102-02-6	-2.06	65799-47-5	-3.56	68515-50-4	-2.69
58244-29-4	-2.69	66068-84-6	-0.88	68526-79-4	-2.96
58567-11-6	-1.58	66142-15-2	-1.09	68526-83-0	-1.94
58574-03-1	-2.05	66222-24-0	-2.70	68526-84-1	-2.67
59191-78-5	-2.48	66327-54-6	-1.47	68527-79-7	-1.73
59259-38-0	-2.49	66408-78-4	-2.36	68548-08-3	-2.17
59259-90-4	-2.54	66992-27-6	-3.62	68797-70-6	-1.99
59313-58-5	-2.37	67124-09-8	-0.61	68922-11-2	-2.36
59517-19-0	-1.58	67557-76-0	-1.63	68938-79-4	-3.98
59557-05-0	-2.68	67564-91-4	-1.40	68938-80-7	-3.98
59569-67-4	-2.02	67634-15-5	-2.15	68938-81-8	-3.98
60345-97-3	-2.88	67715-80-4	-2.73	68987-51-9	-3.80
60763-41-9	-1.83	67747-09-5	-2.01	69094-18-4	-3.34
61361-18-0	-3.00	67762-27-0	-0.74	69121-78-4	-2.55
61551-69-7	-1.71	67801-46-1	-1.89	69205-13-6	-1.10
61683-99-6	-2.31	67801-47-2	-2.18	70172-00-8	-1.33
61792-11-8	-2.58	67845-26-5	-3.06	70293-55-9	-1.84
61810-55-7	-1.41	67860-38-2	-3.48	70356-09-1	-2.97
61889-11-0	-2.20	67879-60-1	-3.07	70693-50-4	0.76
61949-23-3	-2.95	67905-32-2	-1.87	70714-66-8	0.09
62346-96-7	-2.82	67906-30-3	-2.45	71077-33-3	-2.02
62561-74-4	-2.79	67953-77-9	-2.54	71441-80-0	-1.22
63046-09-3	-1.95	67989-23-5	-4.31	71672-75-8	-2.97
63133-74-4	-2.39	68047-06-3	-1.35	72207-94-4	-2.71
63149-22-4	-1.58	68258-95-7	-2.23	72541-09-4	-1.90
63449-68-3	-2.16	68334-62-3	-2.79	72928-52-0	-2.55
63943-89-5	-3.36	68345-22-2	-1.64	73566-30-0	-0.75
64577-91-9	-1.83	68359-37-5	-1.30	74094-60-3	-2.94
64988-06-3	-2.68	68366-65-4	-2.47	74367-97-8	-2.31

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
75980-60-8	-1.60	94386-39-7	-1.84	195520-32-2	-1.73
76578-12-6	-2.26	94386-48-8	-1.80	291314-39-1	-2.78
77098-07-8	-3.50	94944-51-1	-3.38	391197-78-7	-0.56
77182-82-2	-2.32	95737-68-1	-1.18		
77635-32-6	-1.99	96478-09-0	-2.83		
78587-05-0	-3.53	96489-71-3	-1.48		
78761-38-3	-2.59	96562-58-2	-3.01		
78761-39-4	-2.93	99422-01-2	-1.64		
79127-80-3	-1.27	100760-25-6	-3.85		
79922-55-7	-0.37	104222-32-4	-0.42		
80443-63-6	-1.28	104821-25-2	-1.31		
80550-09-0	-1.63	108238-41-1	-2.32		
80844-07-1	-1.08	110235-47-7	-2.53		
80866-83-7	-2.28	110726-28-8	-1.45		
81936-33-6	-0.92	112290-07-0	-4.07		
83111-01-7	-4.15	113170-55-1	-2.46		
83623-32-9	-1.34	114040-31-2	-3.44		
84029-92-5	-2.20	114369-43-6	-0.66		
84375-71-3	-2.59	118585-13-0	-1.58		
84632-65-5	-3.19	119094-83-6	-2.80		
84787-87-1	-1.71	119168-77-3	-2.47		
85068-29-7	-3.14	119515-38-7	-2.29		
85238-31-9	-5.54	121199-28-8	-1.68		
85895-78-9	-4.13	126990-35-0	-4.44		
87061-04-9	-0.44	129136-92-1	-1.74		
87820-88-0	-1.82	129283-82-5	-2.25		
88385-22-2	-1.53	143807-66-3	-1.10		
93892-03-6	-2.56	149979-41-9	-1.76		
93892-04-7	-2.71	159011-87-7	-1.65		
93892-05-8	-1.74	160430-64-8	-2.83		
93919-04-1	-2.04	161728-47-8	-2.98		
94050-90-5	-2.91	161981-34-6	-2.13		
94089-21-1	-2.74	178813-81-5	-3.03		
94089-23-3	-2.21	195520-29-7	-1.82		

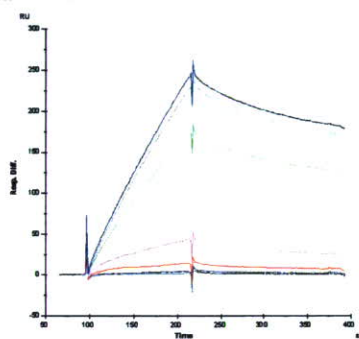
厚生労働科学研究費補助金（化学物質リスク研究事業）
生体の作用点、特に核内受容体及び関連転写因子群に着目した化学物質の
毒性発現機構の解明や毒性予測手法の開発を行う研究

総括研究報告書 図表

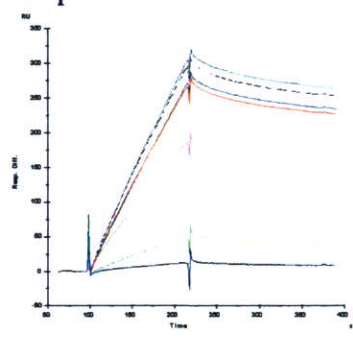
添付 4

（2）核内受容体作用物質による生体標的分子相互作用への影響の解析と評価手法の開発
研究 図表

ERa-LxxLL



ERa-apo1



- ER
- E2 1.37E-10
- E2 4.12E-10
- E2 1.23E-09
- E2 3.70E-09
- E2 1.11E-08
- E2 3.33E-08
- E2 1.00E-07

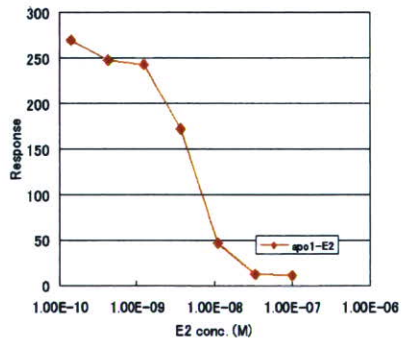
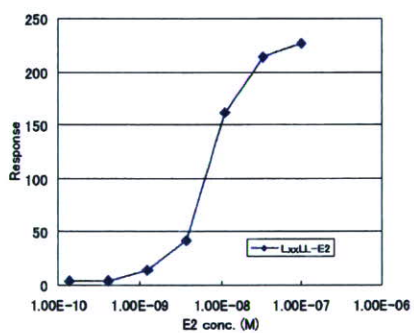


図1 ER-LxxLL, ER-APO1相互作用の17β エストラジオール濃度依存性変化

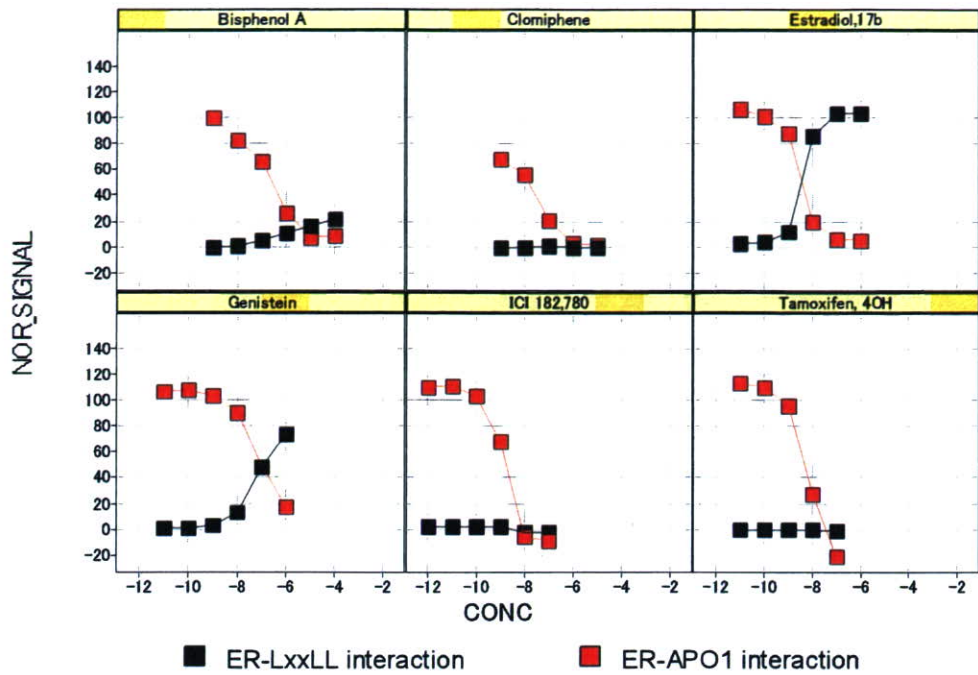


図2 代表的なエストロゲン受容体作用物質によるER-LxxLL, ER-APO1相互作用変化

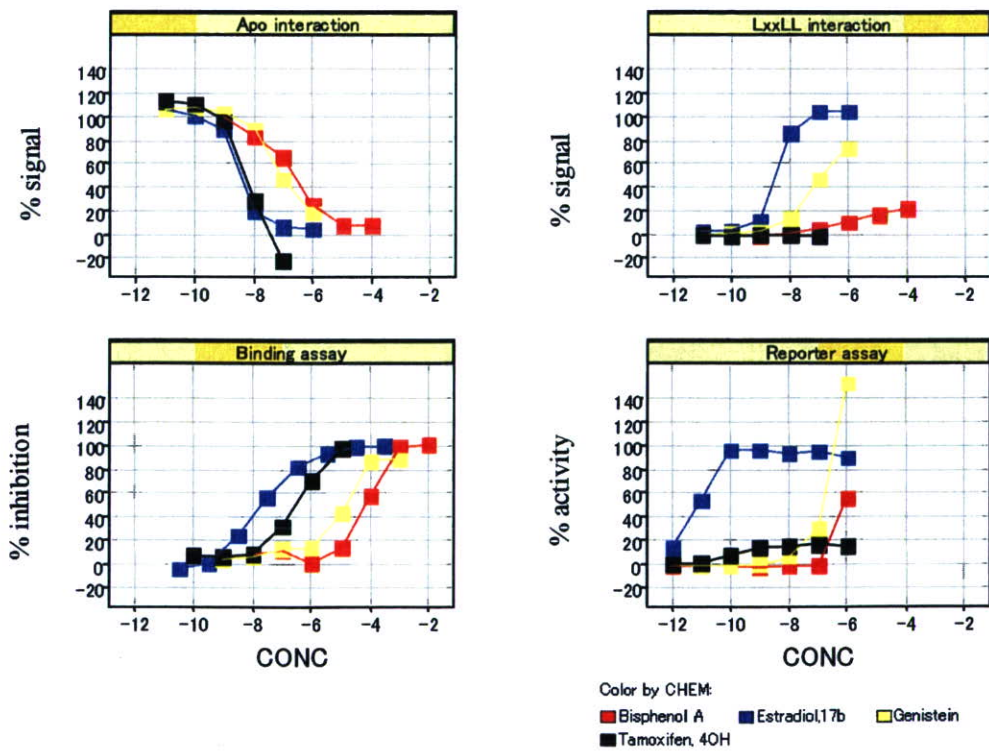


図3 ER-LxxLL, ER-APO1相互作用変化と他のスクリーニングデータとの比較

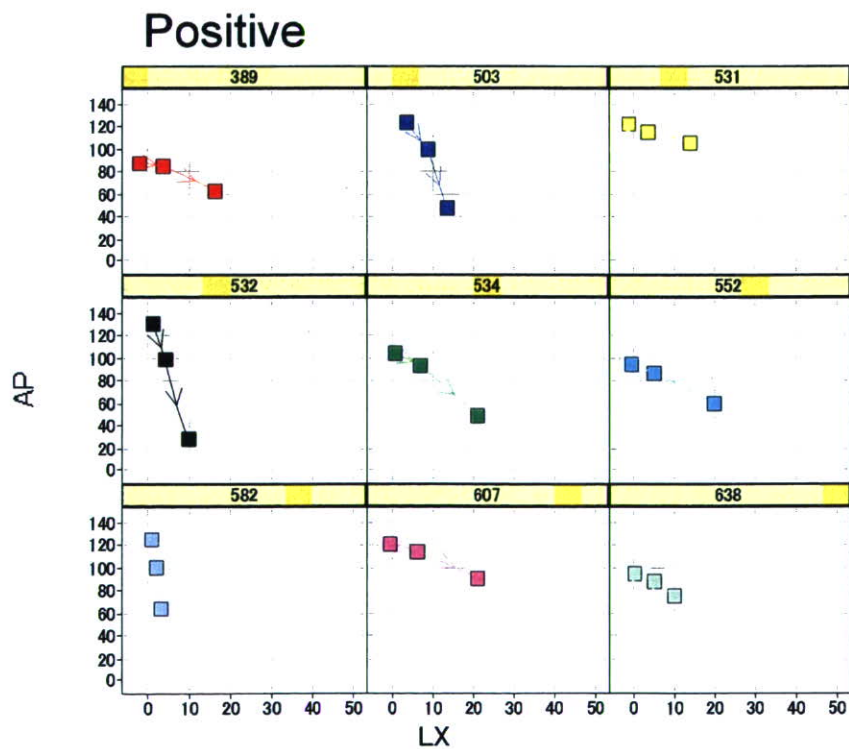
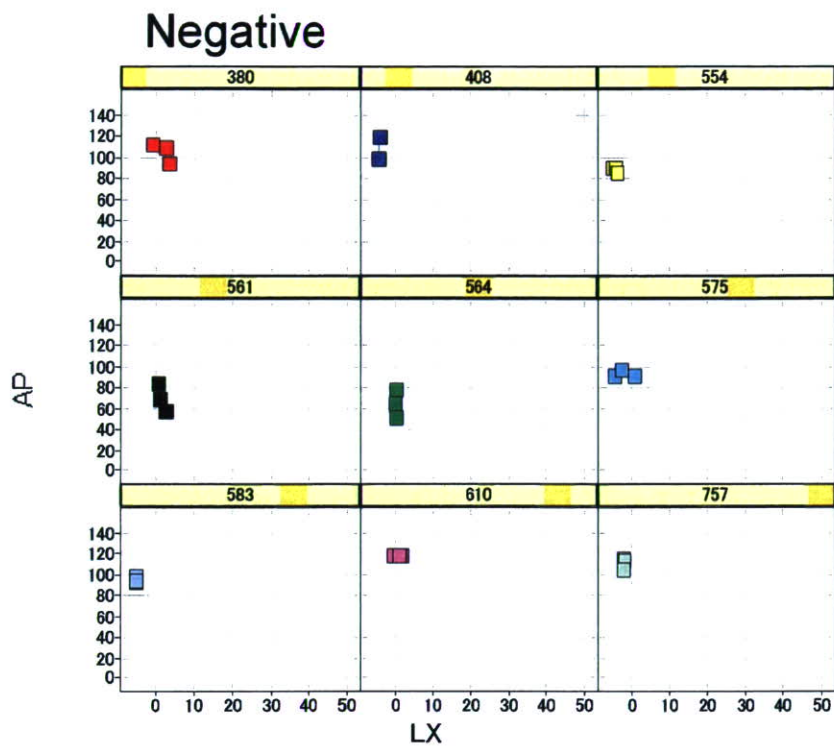


図4 ER-LxxLL, ER-APO1相互作用変化を指標とした化学物質の受容体作用評価結果
:パネル上の数値は化学物質ID

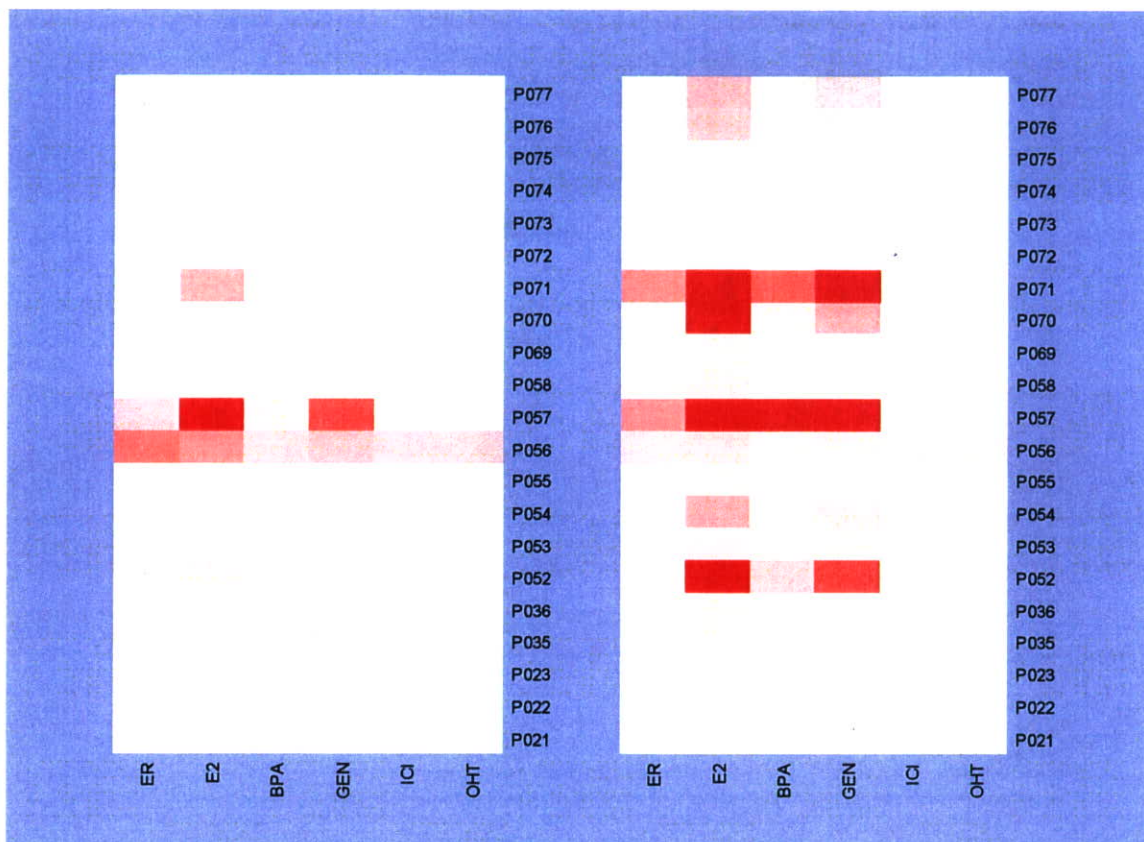


図5 データベース探索による候補ペプチドの各種リガンド存在下での ER α 、ER β 相互作用活性

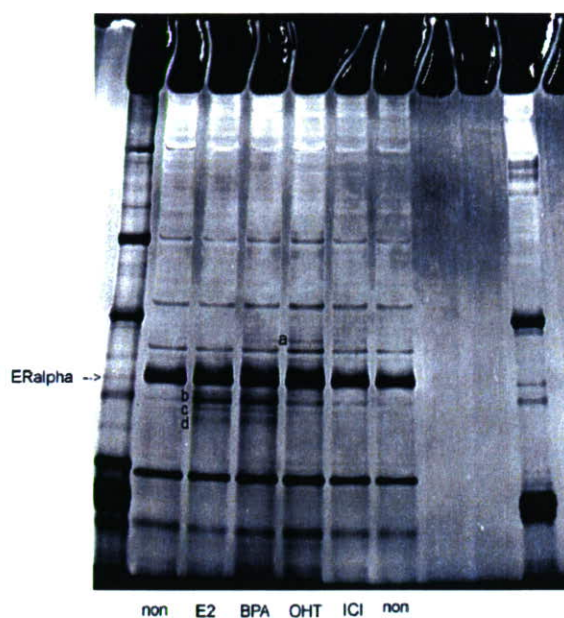


図7. MCF7核抽出液中の各種リガンド結合型ERαとの結合成分の検討

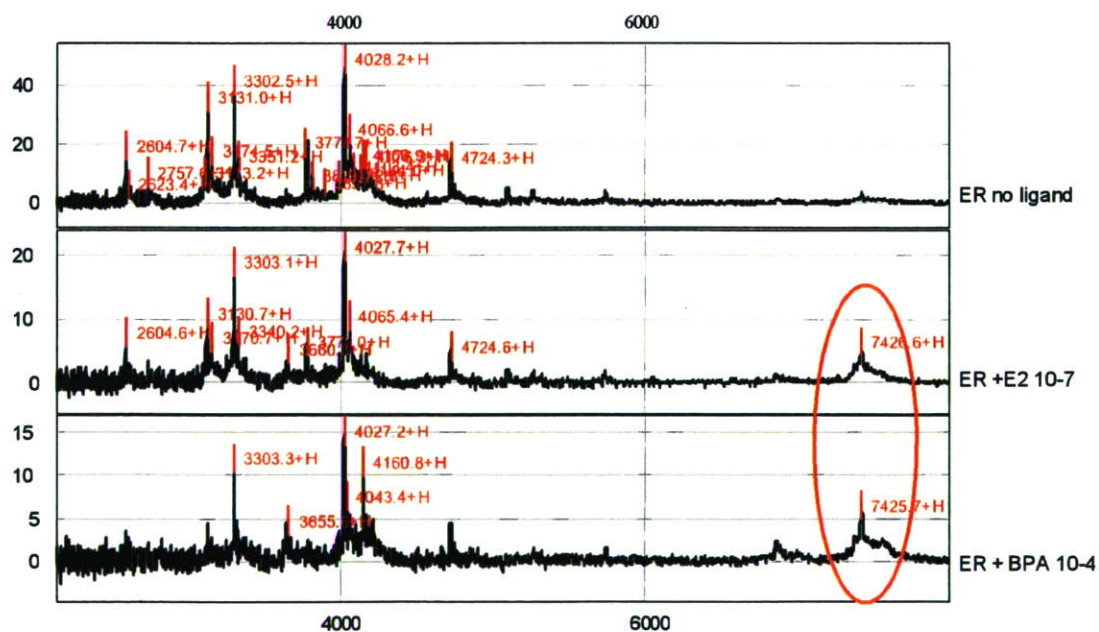


図6 核タンパク質トリプシン消化物からのリガンド特異的ER結合成分のTOF-MS解析

厚生労働科学研究費補助金（化学物質リスク研究事業）
生体の作用点、特に核内受容体及び関連転写因子群に着目した化学物質の
毒性発現機構の解明や毒性予測手法の開発を行う研究

総括研究報告書 図表

添付 5

（3）受容体作用物質ターゲット細胞の転写制御関連分子プロファイルの研究 図表

表1 核内レセプターならびに核内レセプター関連遺伝子の遺伝子発現解析を実施した細胞

細胞名	由来組織	培地	倍加時間	細胞名	由来組織	培地	倍加時間
MCF-7	乳癌	EMEM	58h	UE6E7T-3	骨髓幹細胞	α -MEM	58h
YMB-1	乳癌	RPMI1640	80h	Yub622	小児余剰指	Poweredby10	54h
NEC14	精巢	RPMI1640	62h	PL502	胎盤	Plusoid-M	71h
NEC8	精巢	RPMI1640	76h	PL532	胎盤	Plusoid-M	64h
NCR-G3	精巢	G031101	54h	OVKATE	卵巣	RPMI1640	15d
NCR-G2	精巢	G031101	63h	RKN	卵巣	F-12	96h
NCR-G1	精巢	G031101	60h	RMG-I	卵巣	F-12	88h
HEC-1-A	子宮内膜	EMEM	72h	PC-3	前立腺	F-12K	90h
HEC-108	子宮内膜	EMEM	56h	8305C	甲状腺	EMEM	84h
HEC-151	子宮内膜	EMEM	49h	8505C	甲状腺	EMEM	59h
HEC-251	子宮内膜	EMEM	51h	KMH-2	甲状腺	DMEM x RPMI	99h
SNG-II	子宮内膜	F-12	53h	TCO-1	甲状腺	DMEM	78h
SKG-II	子宮内膜	F-12	47h	HUV-EC-C	血管	MCDB107	58h
NCE16	子宮頸部	MCDB153	75h	RPMI-1788	血球	RPMI1640	34h
HeLa	子宮頸部	EMEM	39h	Flow3000	胎児神経	EMEM	79h
HeLa S3	子宮頸部	F-12	36h	KMS-6	胎児繊維芽	EMEM	43h
HepG2	肝癌	DMEM	32h	SW-13	副腎皮質	L-15	74h
LI90	肝to細胞	DMEM	68h	MRC-5	胎児肺	EMEM	57h
HuH-7	肝癌	DMEM	52h	MRC-9	胎児肺	EMEM	49h
JHH-1	肝癌	William's E	49h	WI-38	胎児肺	EMEM	39h
KMRC-3	腎臓	DMEM	12d	SF-TY	皮膚	EMEM	36h
KMRC-1	腎臓	DMEM	11d	TIG-101	皮膚	EMEM	45h
293	腎臓	EMEM	57h	UCBTERT-21	骨髓幹細胞	α -MEM	39h
Caki-1	腎臓	EMEM	43h	THP-1	末梢血	RPMI1640	20h
U937	単芽球	RPMI1640	25h	KMS-11	ミエローマ	RPMI-1640	24h

表2 遺伝子発現解析に用いる核内受容体プローブ一覧

レセプター	プロダクトID	レセプター	プロダクトID	レセプター	プロダクトID	レセプター	プロダクトID
1	AR Hs00171172.ml	14	GR Hs00354508.ml	23	NGF-B γ Hs00545007.ml	34	REVERB β Hs00233309.ml
2	CAR Hs00231959.ml		Hs00353740.ml		Hs00175077.ml	35	ROR α Hs00536545.ml
3	COUP-TF I Hs00818842.ml		Hs00230818.ml		Hs00235001.ml	36	ROR β Hs00199445.ml
4	COUP-TF II Hs00819630.ml		Hs00230813.ml	24	PNR Hs00183917.ml	37	ROR γ Hs00172858.ml
5	DAX1 Hs00230864.ml	15	HNF4 α Hs00230853.ml		Hs00183915.ml		Hs00172860.ml
6	EP2 Hs00172870.ml	16	HNF4 γ なし	25	PPAR α Hs00231882.ml	38	RXR α Hs00172565.ml
7	ERR α Hs00607062.g1	17	LRFH-1 Hs00187067.ml	26	PPAR γ Hs00234592.ml	39	RXR β Hs00232774.ml
8	ERR β Hs00395184.ml	18	LXR α Hs00172885.ml	27	PPAR δ Hs00606262.ml	40	RXR γ Hs00199455.ml
	Hs00374442.ml	19	LXR β Hs00173195.ml		Hs00606407.ml	41	SF-1 Hs00610436.ml
9	ERR γ Hs00155006.ml	20	MR Hs00230906.ml	28	PR Hs00172183.ml	42	SHP Hs00222677.ml
10	ER α Hs00174860.ml	21	NGF-B α Hs00172437.ml	29	PXR Hs00254365.ml	43	TLX Hs00172664.ml
11	ER β Hs00230957.ml		Hs00544986.ml		Hs00243666.ml	44	TR2 Hs00172676.ml
12	FXR Hs00231968.ml		Hs00374225.ml	30	RAR α Hs00230907.ml	45	TR β Hs00231489.ml
13	GCNF Hs00364256.ml	22	NGF-B β Hs00428691.ml	31	RAR β Hs00233405.ml	46	TR α Hs00268470.ml
	Hs00265966.ml				Hs00233407.ml	47	TR β Hs00230861.ml
				32	RAR γ Hs00171273.ml	48	VDR Hs00172113.ml
				33	REVERB γ Hs00253876.ml		

Cell No. JCRB0160

Cell Name **L190**

ESR1	RXRA	AR	PPARG	THRB	PPARA
RARA	ESR2		HNF4A	RXRB	THRA
PGR	NR0B2	RARB	NR5A1	NR4A1	PPARD
VDR	NR1H3	ESRRA	NR0B1	RXRG	NR2F1
NR2F2	R5A2	NR2C2	NR1I3	NR1H4	NR1H2
RORA	ESRRG	RARG	NR2C1	NR3C2	NR1I2
NR1D1	ESRRB	NR4A2	NR4A3	NR1D2	HNF4G
NR2F6	RORC	NR6A1	NR2E3	RORB	NR2E1

- 高発現
- 中発現
- 低発現
- 0

細胞毎の核内レセプター発現情報

Cell No. JCRB9004

Cell Name **HeLa**

AR	androgen receptor
-----------	-------------------

NR0B1	ESR1	NR3C1	RXRB	NR5A1	NR0B2
NR2C1	NR2C2	THRB			
ATF2	BRCA1	OGND1	CCNE1	GDK7	GDK9
CDKN1A	CREB1	CREBBP	CRSP2	CTNNB1	FHL2
GAPDH	HTATIP	MED12	MYC	NCOA1	NCOA2
NCOA3	NCOA4	NCOA6	NCOA1	NCOA2	NRIP1
NSD1	PIAS1	PIAS2	PNRC1	PPARBP	RAN
RB1	RNF14	RNF4	THRAP4		

AR androgen receptor

Summary:

The androgen receptor gene is more than 90 kb long and codes for a protein that has 3 major functional domains: the N-terminal domain, DNA-binding domain, and androgen-binding domain. The protein functions as a steroid-hormone activated transcription factor. Upon binding the hormone ligand, the receptor dissociates from accessory proteins, translocates into the nucleus, dimerizes, and then stimulates transcription of androgen responsive genes. This gene contains 2 polymorphic trinucleotide repeat segments that encode polyglutamine and polyglycine tracts in the N-terminal transactivation domain of its protein. Expansion of the polyglutamine tract causes spinal bulbar muscular atrophy (Kennedy disease). Mutations in this gene are also associated with complete androgen insensitivity (CAIS). Two alternatively spliced variants encoding distinct isoforms have been described.

http://easbiac.uk/srbin/cgi-bin/wgetz7-a+REFSEQP-alltext:NP_000035

図1 ホームページで公開した核内レセプター関連遺伝子の遺伝子発現解析データ

厚生労働科学研究費補助金（化学物質リスク研究事業）
生体の作用点、特に核内受容体及び関連転写因子群に着目した化学物質の
毒性発現機構の解明や毒性予測手法の開発を行う研究

総括研究報告書 図表

添付 6

（4）核内受容体作用による遺伝子相互作用の電算探索手法の研究 図表

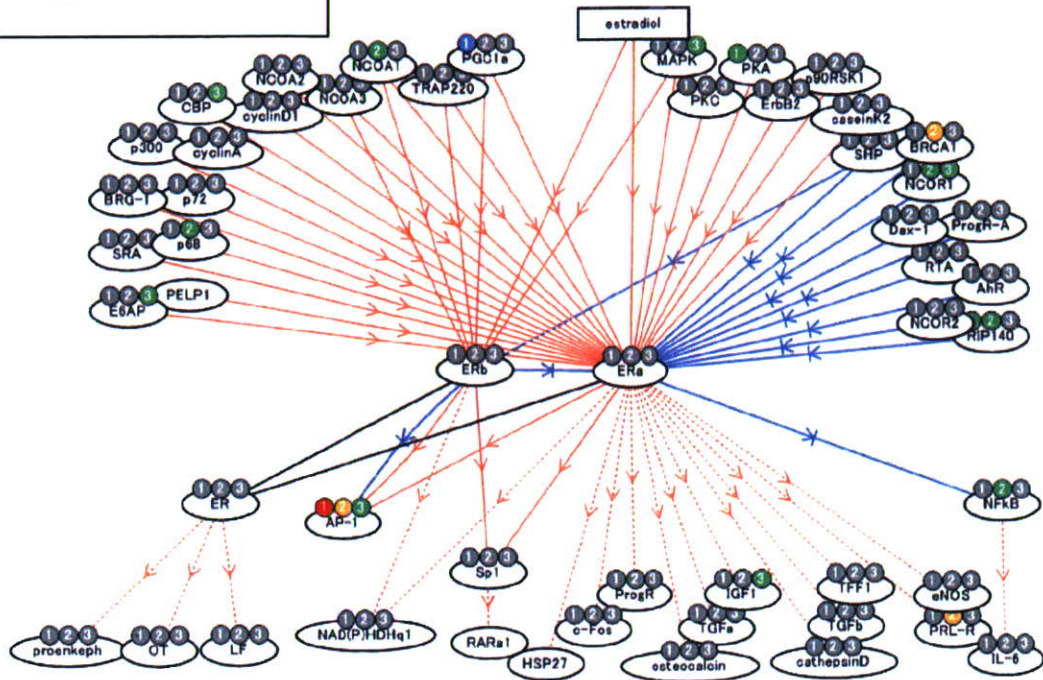
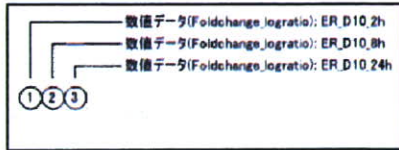


図 1A E2 の“ER による発現調節” への影響(10μg/kg)

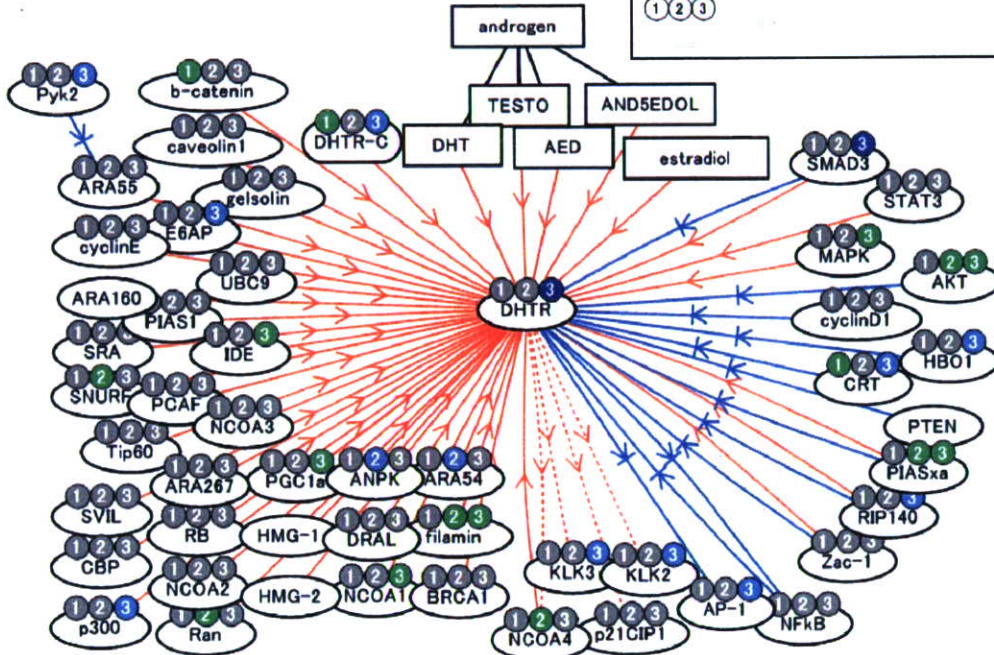
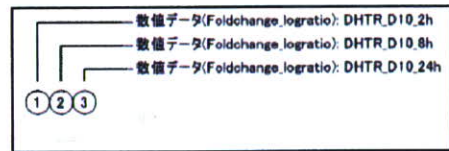


図 1B Testosterone の“Androgen R による発現調節” への影響(10mg/kg)

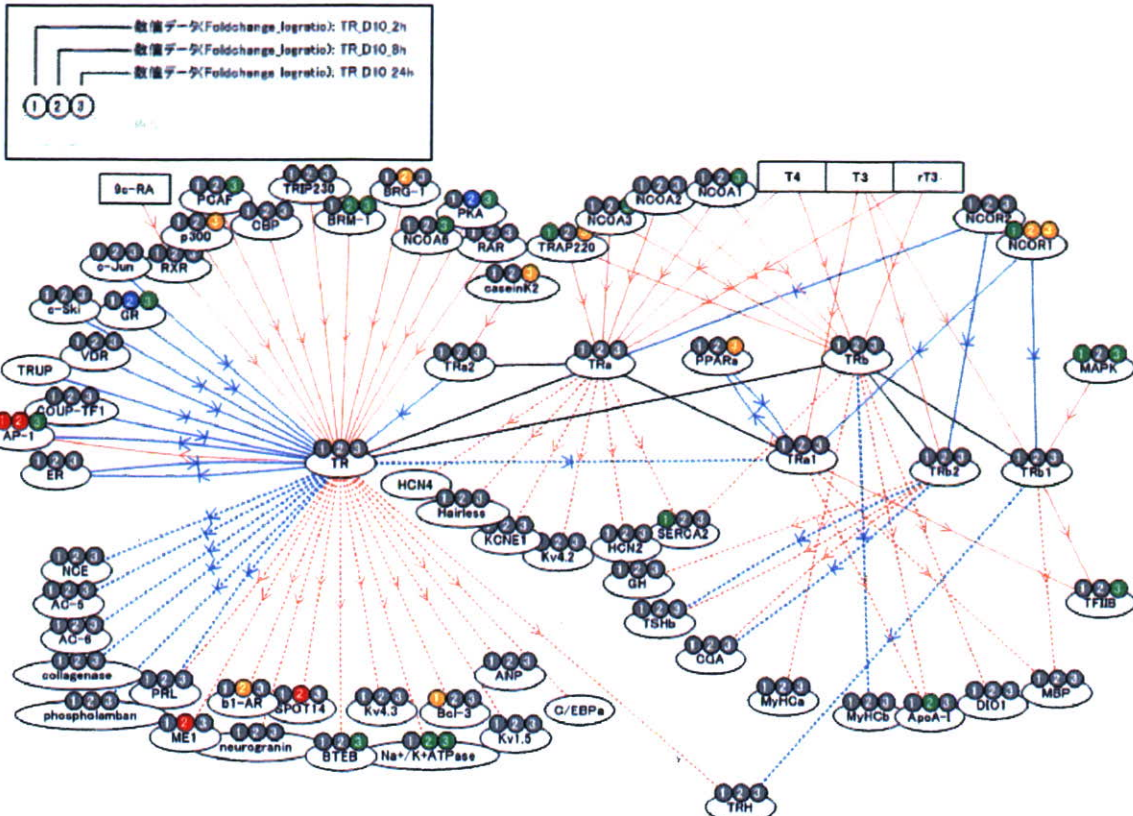


図 1C Thyroxinerone の“TR による発現調節” への影響 (10 μ g/kg)

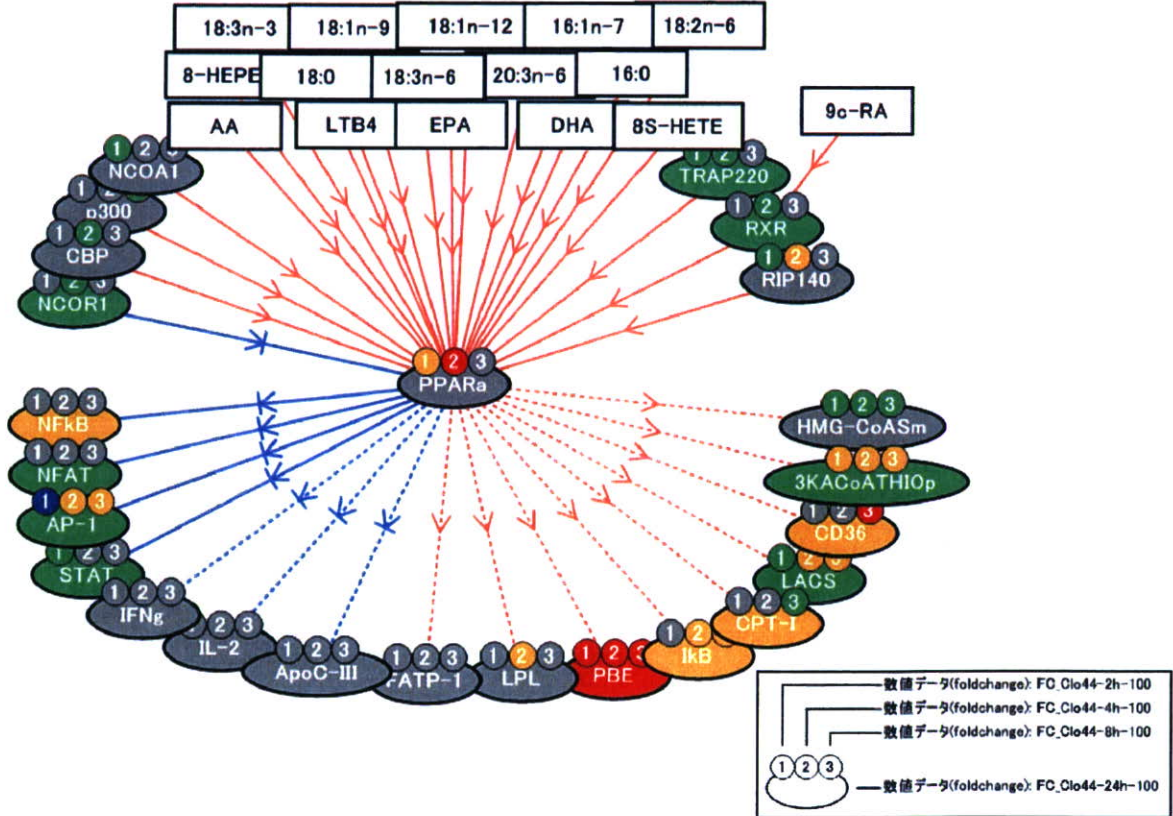


図 1D Clofibrate の“PPAR α による発現調節” への影響 (100mg/kg)

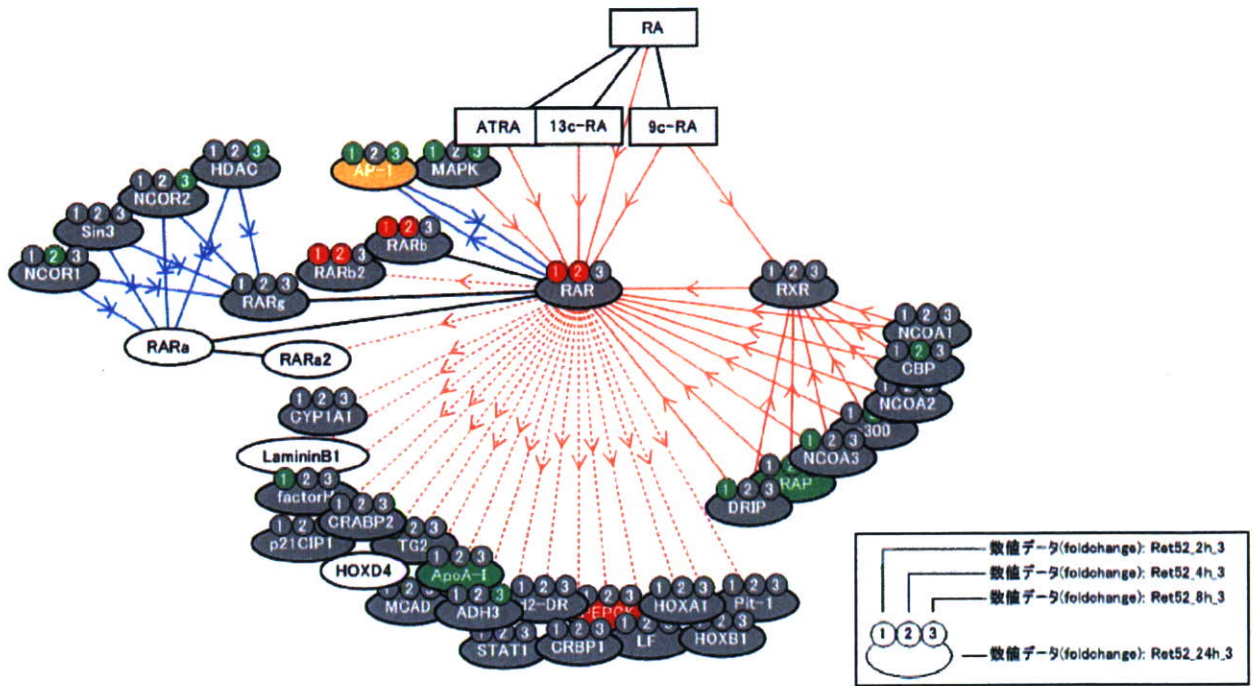


図 1E Retinoic acid の“RARによる発現調節” への影響(3 mg/kg)

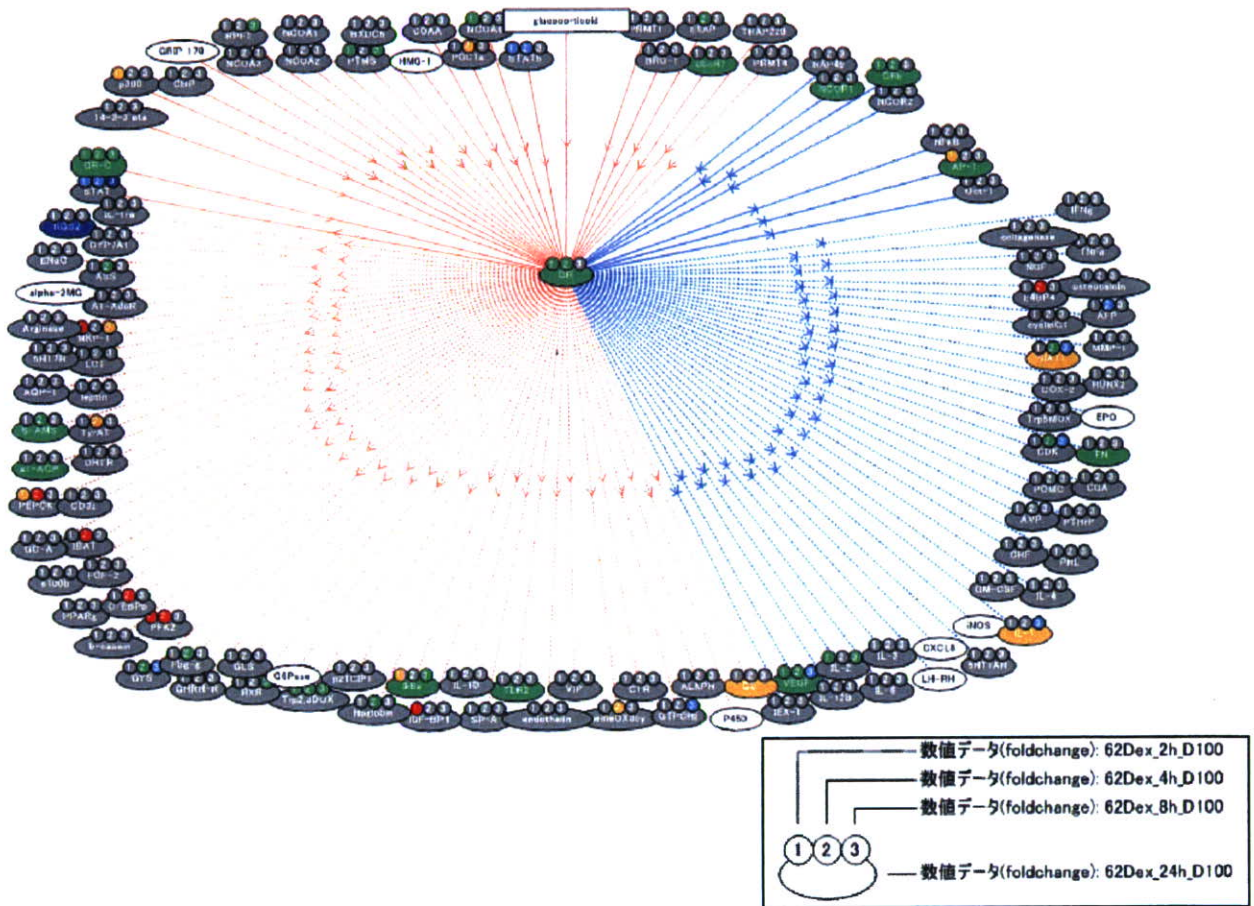


図 1F Dexamathasone の“GRによる発現調節” への影響(100µg/kg)

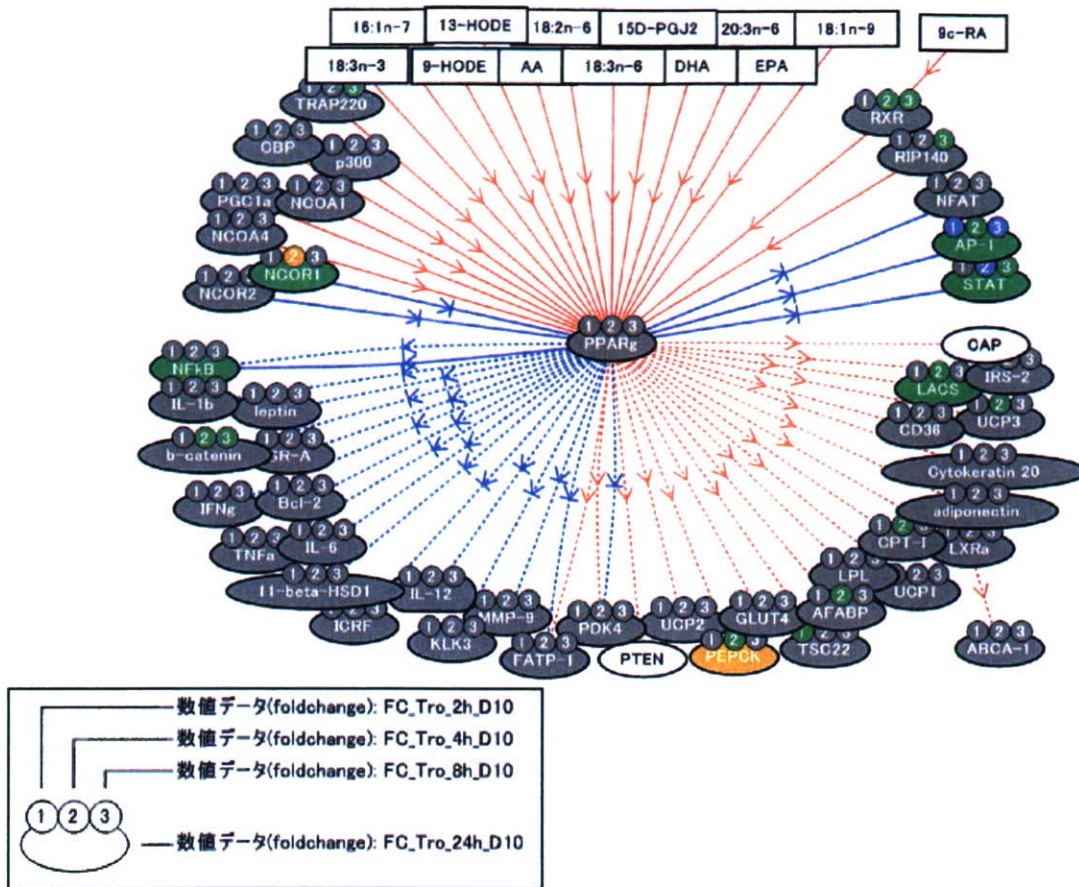


図 1G Troglitazone の“PPAR γ による発現調節” への影響(10mg/kg)

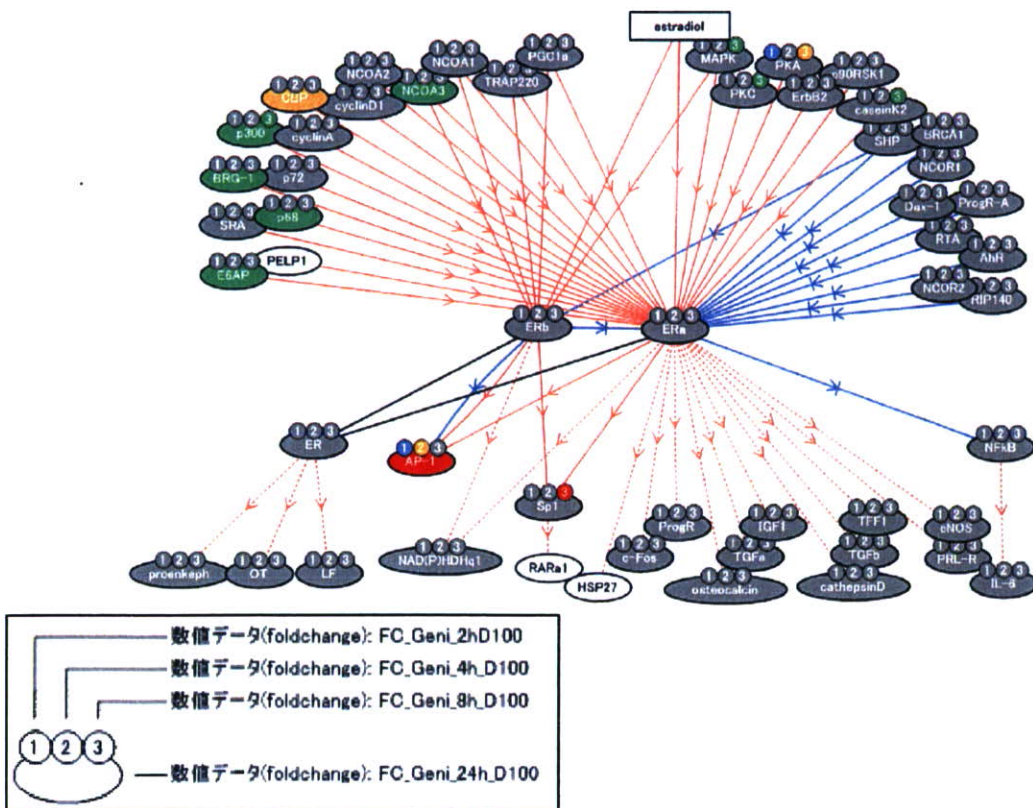


図 1H Genistein の“ER による発現調節” への影響(100mg/kg)

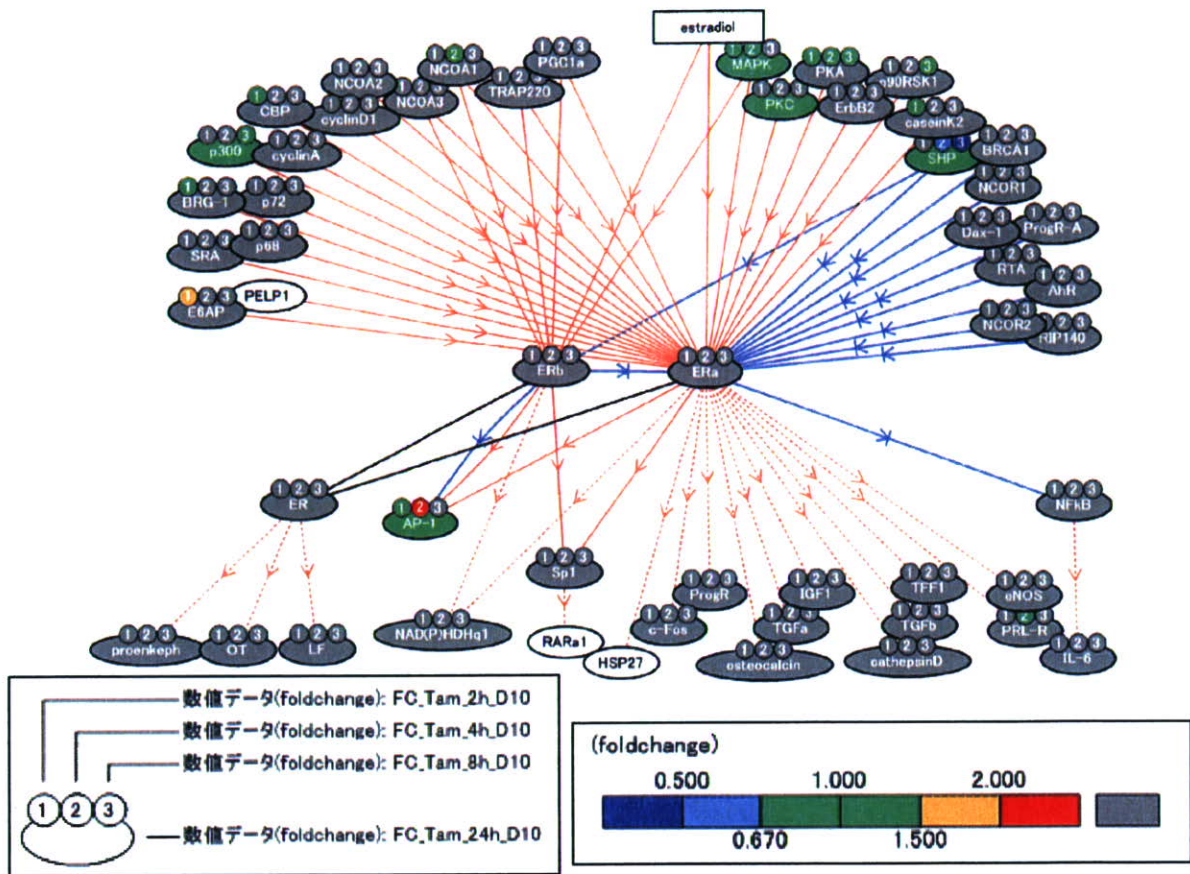


図 1C Tamoxifen の“ER による発現調節” への影響(10 μ g/kg)

Legends

