

1 EINLEITUNG 7

2 DAS REGISTER DER ZYTOTOXIZITÄT (RC) 8

3 DAS ERWEITERTE REGISTER DER ZYTOTOXIZITÄT 9

3.1 Zielstellung 9

3.2 Der Aufbau des erweiterten Registers 9

3.3 Die IC₅₀-Werte 10

3.4 Der Faktor F_s 12

3.5 Die IC_{50x}-Werte 12

3.6 Die LD₅₀-Werte 13

3.7 Physikalisch-chemische Stoffeigenschaften 14

3.8 Abbreviations and selected definitions 15

4 DATENBLÄTTER ZU DEN 361 STOFFEN 16

4.1 Erster Teil (RC I) : Das RC von 1988 mit ergänzten IC₅₀-Werten, RC-Substanz-Nr. I -131

Zweiter Teil (RC 2) : Das RC mit neuen Substanzen, RC-Substanz-Nr. 132- 361 16

4.2 Literatur-Nummern für die IC₅₀-Einzelwerte 25

4.3 Anmerkungen -Ergänzungen 34

5 AUSWERTUNG UND BERECHNUNGEN 36

5.1 Statistisch relevante Parameter 36

5.2 Die Beziehung zwischen der IC_{50x} und LD₅₀ p.o. 37

5.3 Die Beziehung zwischen der IC_{50x} und LD₅₀ i.v. 40

5.4 Die Position der Regressionsgeraden 40

5.5 Schlußfolgerungen 42

6 UNTERSUCHUNGEN ZUR VERBESSERUNG DER LD₅₀-VORHERSAGE 42

6.1 Analyse der Abweicher-Wertepaare IC_{50x} -LD₅₀ p.o. 42

6.2 Multiple Regression mit physikalisch-chemischen Stoffeigenschaften und formalen Parametern

(in Zusammenarbeit mit Dipl.-Math. Ingo Baeger, Forschungsinstitut für Molekulare Pharmakologie) 50

6.3 Schlußfolgerungen 52

7 DIE SPANNWEITE DER IC₅₀-WERTE (F_s > 53

8 ANWENDUNG DES VERFAHRENS ZUR VORHERSAGE DER LD₅₀ 55

8.1 Die Bestimmung der Zytotoxizität 55

8.2 Vergleich der RC-Daten mit der ATC-Methode 59

8.3 Schlußfolgerungen 62

9 PERSPEKTIVEN FÜR DAS RC 64

10 ZUSAMMENFASSENDE SCHLUßFOLGERUNGEN 65

11 ZUSAMMENFASSUNG 66

12 LITERATURVERZEICHNIS 71

13 ALPHABETISCHES SUBSTANZVERZEICHNIS 81

14 SUMMARY 90