

QSAR予測結果

有害性クラスが付与されたQSAR予測値一覧

(単位: mg/L)

No.	化学物質		毒性値						
	物質名	CAS RN	種類	藻類急性	藻類慢性	甲殻類急性	甲殻類慢性	魚類急性	魚類慢性
1	p-ジエチルベンゼン	105-05-5	試験結果	1.9	0.6	32	0.93	1.8	データなし
			KATE	1.2 [0.16 - 9.2]		1 [0.14 - 7.5]	0.14 [0.012 - 1.6]	2.1 [0.29 - 15]	0.079 [0.0078 - 0.80]
			ECOSAR	1.72	0.69	1.05	0.174	1.53	0.187
			TIMES						
2	プロパン-1-アミン	107-10-8	試験結果	77	38	70.7	データなし	308	データなし
			KATE					150 [10 - 2100]	
			ECOSAR	16.52	4.77	13.68	0.932	139.11	14.57
			TIMES					184.63 [57.87 - 589.05]	
3	Benzene, mono C10-13 alkyl derivs.	129813-58-7	試験結果	>0.1	0.05	0.009	0.0075	>100	データなし
			KATE						
			ECOSAR						
			TIMES						
4	α-ブチル-ω-ヒドロキシポリ[オキシ(メチルエチレン)]	単位検討物質 (9003-13-8)	試験結果	ca. 333	62.5	95	データなし	50	データなし
			KATE		26 [3.5 - 200]		13 [0.50 - 360]	590 [120 - 2900]	
			ECOSAR	231.89	49.28	458.78	34.46	887.43	77.66
			TIMES						
5	エチレン=ビスステアリン酸アミド[別名:エチレンビスステアロアמיד]	110-30-5	試験結果	>0.053	>=0.053	>0.0022	>0.0056	>0.0274	データなし
			KATE						
			ECOSAR						
			TIMES						
6	L-アルギニン=モノヒドロクロリド	1119-34-2	試験結果	データなし	データなし	>1000	データなし	>1000	データなし
			KATE						
			ECOSAR	5.74E+05	1.15E+05	1.75E+05	7280	2.95E+06 ※	1.44E+06 ※
			TIMES						

No.	化学物質		毒性値						
	物質名	CAS RN	種類	藻類急性	藻類慢性	甲殻類急性	甲殻類慢性	魚類急性	魚類慢性
7	N-メチルカルバミン酸2,3-ジヒドロ-2,2-ジメチル-7-ベンゾ[b]フラニル	1563-66-2	試験結果	1.98	0.4	0.029	0.0098	0.386	0.0026
			KATE						
			ECOSAR	2.59	13.26	0.00931	0.016	4.27	0.408
			TIMES						
8	フルフラール	98-01-1	試験結果	32	5.8	20.4	1.9	5.8	0.33
			KATE						
			ECOSAR	11.13	3.64	21.55	0.194	21.14	5.36
			TIMES					27.38 [8.69 - 86.22]	
9	オクタデカン	593-45-3	試験結果	データなし	データなし	データなし	データなし	データなし	データなし
			KATE						
			ECOSAR						
			TIMES						
10	$\alpha$ -ヒドロ- $\omega$ -(オレオイルオキシ)ポリ(オキシエチレン)	9004-96-0	試験結果	>52.7	0.072	77.2	データなし	59.9	データなし
			KATE						
			ECOSAR		0.00542		0.00256		0.00135
			TIMES						

・「試験結果」…資料1-4参照

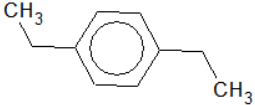
・[ ]内…95%予測区間

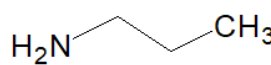
・毒性値の後ろの※…水溶解度超

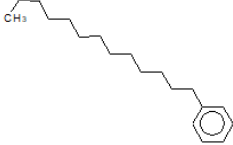
・灰色ハッチ…有害性クラスが付与されたQSARクラスなし。

・有害性クラスが付与されたQSARクラスが複数ある場合は最小の毒性値を記載。

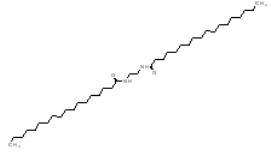
QSAR予測結果

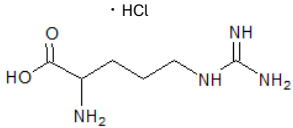
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値			
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8	
1	CAS RN 105-05-5  p-ジエチルベンゼン    CCc1ccc(cc1)CC  分子量 134.22 水溶解度(実測) 31.9mg/L  試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類  水溶解度(予測) ※1 10.85mg/L  Log P(Kow Win) ※2 4.07 LogBCFmax ※3 3.04 EnergyLUMO ※4 0.51eV  備考:	藻類	急性	有害性クラス2相当	有害性クラス2相当	判定不能	
				narcotic group Alga Acute $R^2:0.76$ $Q^2:0.74$ n:52 1.2mg/L [0.16 - 9.2]	Neutral Organics [MAX LogP=6.40] $R^2:0.68$ n:41 1.72mg/L	Baseline narcotics $R^2:0.78$ n:100 1.16mg/L [0.13 - 10.00] ※D(ドメイン外)	
			慢性	判定不能	有害性クラス3相当	判定不能	
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] $R^2:0.68$ n:41 0.690mg/L		
			甲殻類	急性	有害性クラス2相当	有害性クラス3相当	判定不能
					● narcotic group Daphnid Acute $R^2:0.71$ $Q^2:0.7$ n:83 1mg/L [0.14 - 7.5]	Neutral Organics [MAX LogP=5.00] $R^2:0.77$ n:98 1.05mg/L	Baseline narcotics $R^2:0.9$ n:30 1.07mg/L [0.381 - 3.00] ※D(ドメイン外)
				C_X hydrocarbon unreactive aromatic fused R=0 w/o X $R^2:0.8$ $Q^2:0.74$ n:17 1.2mg/L [0.37 - 3.6]			
		慢性		有害性クラス3相当	有害性クラス3相当	判定不能	
				● narcotic group Daphnid Chronic $R^2:0.7$ $Q^2:0.68$ n:74 0.14mg/L [0.012 - 1.6]	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] $R^2:0.77$ n:98 0.174mg/L		
				C_X hydrocarbon unreactive aromatic fused R=0 w/o X $R^2:0.87$ $Q^2:0.83$ n:15 0.15mg/L [0.035 - 0.66]			
		魚類	急性	有害性クラス2相当	有害性クラス2相当	判定不能	
				● narcotic group Fish Acute $R^2:0.87$ $Q^2:0.87$ n:154 2.1mg/L [0.29 - 15]	Neutral Organics [MAX LogP=5.00] $R^2:0.88$ n:296 1.53mg/L	Baseline narcotics $R^2:0.89$ n:221 1.53mg/L [0.622 - 3.78] ※D(ドメイン外)	
	C_X hydrocarbon unreactive aromatic fused R=0 w/o X $R^2:0.85$ $Q^2:0.79$ n:24 2.6mg/L [0.71 - 9.7]						
慢性	有害性クラス2相当		有害性クラス3相当	判定不能			
	● Cnos_X unreactive Fish Chronic $R^2:0.76$ $Q^2:0.68$ n:12 0.079mg/L [0.0078 - 0.80]		Neutral Organics [MAX LogP=8.00] $R^2:0.88$ n:296 0.187mg/L				
	narcotic group Fish Chronic $R^2:0.82$ $Q^2:0.75$ n:12 0.081mg/L [0.0088 - 0.74]						
	C_X hydrocarbon unreactive $R^2:0.78$ $Q^2:0.68$ n:11 0.089mg/L [0.0087 - 0.91]						

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8
2	CAS RN 107-10-8 プロパン-1-アミン  NCCC 分子量 59.11 水溶解度(実測) 1000000mg/L 試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類 水溶解度(予測) ※1 543800mg/L Log P(Kow Win) ※2 0.34 LogBCFmax ※3 1.04 EnergyLUMO ※4 3.62eV 備考:	藻類	急性	判定不能	有害性クラス3相当	判定不能
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aliphatic Amines [MAX LogP=6.40] R <sup>2</sup> :0.78 n:35 <b>16.52mg/L</b>	Narcotic Amines R <sup>2</sup> :0.64, n:14 <b>20.40mg/L</b> [2.86 - 146.00] ※D(ドメイン外)
					Neutral Organics [MAX LogP=6.40] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 <b>287.78mg/L</b>	
			慢性	判定不能	有害性クラス4相当	
			判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aliphatic Amines [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.78 n:35 <b>4.77mg/L</b>		
				Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 <b>53.61mg/L</b>		
		甲殻類	急性	判定不能	有害性クラス4相当	判定不能
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aliphatic Amines [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.76 n:24 <b>13.68mg/L</b>	Reactive unspecified <=3288mg/L [1204 - 8978] (minimum toxicity)
					Neutral Organics [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 <b>727.08mg/L</b>	
			慢性	判定不能	有害性クラス3相当	
			判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aliphatic Amines [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.76 n:24 <b>0.932mg/L</b>		
				Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 <b>46.33mg/L</b>		
魚類	急性	有害性クラス4相当	有害性クラス4相当	有害性クラス4相当		
		amine primary unreactive NH2=1 aliphatic R <sup>2</sup> :0.84 Q <sup>2</sup> :0.81 n:26 <b>150mg/L</b> [10 - 2100]	● Aliphatic Amines [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.79 n:90 <b>139.11mg/L</b>	Narcotic amines R <sup>2</sup> :0.86, n:55 <b>184.63mg/L</b> [57.87 - 589.05]		
		Neutral Organics [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 <b>1492mg/L</b>				
	慢性	判定不能	有害性クラス外相当			
判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aliphatic Amines [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.79 n:90 <b>14.57mg/L</b>					
	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 <b>121.77mg/L</b>					

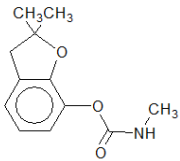
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8
3	CAS RN 129813-58-7 Benzene, mono C10-13 alkyl deriv.  CCCCCCCCCCCCc1ccccc1 分子量 260.47 水溶解度(実測) 試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類 水溶解度(予測) ※1 0.0002099mg/L Log P(Kow Win) ※2 8.43 LogBCFmax ※3 3.62 EnergyLUMO ※4 0.52eV 備考:トリデシルベンゼン(CAS RN® 123-02-4)について予測	藻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
			急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
		甲殻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
			急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
		魚類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
			急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	

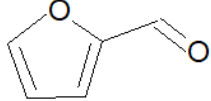
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8
4	単位検討物質 (CAS RN 9003-13-8) $\alpha$ -ブチルー $\omega$ -ヒドロキシポリ[オキシ(メチルエチレン)]  <chem>CCCCOC(C)CO</chem> 分子量 132.2 水溶解度(実測) 423000mg/L 試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類 水溶解度(予測) ※1 42100mg/L Log P(Kow Win) ※2 0.98 LogBCFmax ※3 1.16 EnergyLUMO ※4 2.82eV 備考: PO数1(構造式n=1)について予測	藻類	急性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能
				CO_X ether unreactive excl. HRAC Ea Alga R <sup>2</sup> :0.92 Q <sup>2</sup> :0.82 n:9 580mg/L [83 - 4100] ※P(LogP適用領域外)	Neutral Organics [MAX LogP=6.40] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 231.89mg/L	Baseline narcotics R <sup>2</sup> :0.78, n:100 354.00mg/L [39.40 - 3180] ※D(ドメイン外)
			慢性	有害性クラス外相当	有害性クラス外相当	
				CO_X ether unreactive excl. HRAC Ea Alga R <sup>2</sup> :0.89 Q <sup>2</sup> :0.86 n:15 26mg/L [3.5 - 200]	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 49.28mg/L	
		甲殻類	急性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能
				CO_X ether unreactive R <sup>2</sup> :0.83 Q <sup>2</sup> :0.74 n:15 360mg/L [27 - 4800] ※P(LogP適用領域外)	Neutral Organics [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 458.78mg/L	Baseline narcotics R <sup>2</sup> :0.9, n:30 1453mg/L [544.68 - 3874] ※D(ドメイン外)
			慢性	有害性クラス外相当	有害性クラス外相当	
				CO_X ether unreactive R <sup>2</sup> :0.88 Q <sup>2</sup> :0.76 n:10 13mg/L [0.50 - 360]	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 34.46mg/L	
		魚類	急性	有害性クラス4相当	有害性クラス4相当	判定不能
				● CO_X alcohol unreactive w/ EO R <sup>2</sup> :0.98 Q <sup>2</sup> :0.97 n:5 590mg/L [120 - 2900]	Neutral Organics [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 887.43mg/L	Baseline narcotics R <sup>2</sup> :0.89, n:221 1405mg/L [569.10 - 3471] ※D(ドメイン外)
				CO_X ether unreactive R <sup>2</sup> :0.87 Q <sup>2</sup> :0.86 n:44 820mg/L [69 - 9900]		
			慢性	判定不能	有害性クラス外相当	
		判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 77.66mg/L			


No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8
5	CAS RN 110-30-5 エチレン=ビスステアリン酸アミド[別名:エチレンビスステアロアמיד]  <chem>O=C(NCCNC(CCCGCCGCCGCCGCCGCC)=O)CCCCCCCCCCCC</chem> 分子量 593.04 水溶解度(実測) 試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類 水溶解度(予測) ※1 2.049E-10mg/L Log P(Kow Win) ※2 13.98 LogBCFmax ※3 0.98 EnergyLUMO ※4 1.25eV 備考:	藻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	<b>Amides</b> [MAX LogP=6.40] R <sup>2</sup> :0.3 n:18 <b>7.10E-7mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	<b>Baseline narcotics</b> R <sup>2</sup> :0.78, n:100 <b>5.20E-8mg/L*</b> (水溶解度超)[±2.60E-9] ※D(ドメイン外)
				判定不能	<b>Neutral Organics</b> [MAX LogP=6.40] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 <b>1.05E-6mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	
			慢性	判定不能	判定不能	
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	<b>Amides</b> [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.3 n:18 <b>9.00E-5mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	
				判定不能	<b>Neutral Organics</b> [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 <b>3.22E-6mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	
		甲殻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
				<b>CNO_X amide unreactive Daphnid</b> R <sup>2</sup> :0.88 Q <sup>2</sup> :0.7 n:6 <b>2.1E-8mg/L</b> (水溶解度超)[1.4E-12 - 0.00030] ※P(LogP適用領域外)	<b>Amides</b> [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.6 n:23 <b>1.17E-8mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	<b>Baseline narcotics</b> R <sup>2</sup> :0.9, n:30 <b>1.55E+5mg/L*</b> (水溶解度超)[52826 - 4.53E+5] ※D(ドメイン外)
				判定不能	<b>Neutral Organics</b> [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 <b>1.45E-8mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	
			慢性	判定不能	判定不能	
				<b>CNO_X amide unreactive Daphnid</b> R <sup>2</sup> :0.83 Q <sup>2</sup> :0.74 n:8 <b>4.9E-6mg/L</b> (水溶解度超)[7.7E-9 - 0.0032] ※P(LogP適用領域外)	<b>Amides</b> [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.6 n:23 <b>1.60E-7mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	
				判定不能	<b>Neutral Organics</b> [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 <b>3.08E-8mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	
魚類	急性	判定不能	判定不能	判定不能		
		<b>CNO_X amide unreactive</b> R <sup>2</sup> :0.8 Q <sup>2</sup> :0.76 n:21 <b>0.000071mg/L</b> (水溶解度超)[1.5E-6 - 0.0033] ※P(LogP適用領域外)	<b>Amides</b> [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.81 n:31 <b>7.39E-8mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	<b>Baseline narcotics</b> R <sup>2</sup> :0.89, n:221 <b>85538mg/L*</b> (水溶解度超)[34394 - 2.13E+5] ※D(ドメイン外)		
	判定不能	<b>Neutral Organics</b> [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 <b>8.46E-9mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)				
	慢性	判定不能	判定不能			
判断基準(※6)を満たすQSAR式なし		<b>Amides</b> [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.81 n:31 <b>1.86E-7mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)				
判定不能	<b>Neutral Organics</b> [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 <b>3.05E-9mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)					

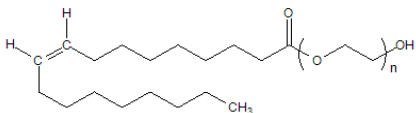
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8
6	CAS RN 1119-34-2 L-アルギニン=モノヒドロクロリド  <chem>O=C(O)C(N)CCCCNC(=N)N</chem> 分子量 174.2 水溶解度(実測) 730000mg/L 試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類 水溶解度(予測) ※1 1000000mg/L Log P(Kow Win) ※2 -4.0 LogBCFmax ※3 0.96 EnergyLUMO ※4 0.93eV 備考:L-アルギニンについて予測	藻類	急性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能
			判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Aliphatic Amines [MAX LogP=6.40] R<sup>2</sup>:0.78 n:35 5.74E+5mg/L</li> </ul>	Reactive unspecified <=4.83E+6mg/L* (水溶解度超)[3.64E+5 - 6.41E+7] (minimum toxicity)	
			慢性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能
			判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Aliphatic Amines [MAX LogP=6.40] R<sup>2</sup>:0.68 n:41 8.67E+6mg/L (水溶解度超)</li> </ul>		
			急性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能
			判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Aliphatic Amines [MAX LogP=8.00] R<sup>2</sup>:0.78 n:35 1.15E+5mg/L</li> <li>● Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R<sup>2</sup>:0.68 n:41 6.61E+5mg/L</li> </ul>		
		甲殻類	急性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能
			判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Aliphatic Amines [MAX LogP=5.00] R<sup>2</sup>:0.76 n:24 1.75E+5mg/L</li> </ul>	Reactive unspecified <=5.47E+7mg/L* (水溶解度超)[1.31E+7 - 2.28E+8] (minimum toxicity)	
			慢性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能
			判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Aliphatic Amines [MAX LogP=8.00] R<sup>2</sup>:0.76 n:24 7280mg/L</li> <li>● Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R<sup>2</sup>:0.77 n:98 2.40E+6mg/L (水溶解度超)</li> </ul>		
			急性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能
			判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Aliphatic Amines [MAX LogP=5.00] R<sup>2</sup>:0.77 Q<sup>2</sup>:0.63 n:12 1.1E+6mg/L (水溶解度超)[21000 - 6.2E+7] ※P(LogP適用領域外)</li> <li>● Aliphatic Amines [MAX LogP=5.00] R<sup>2</sup>:0.79 n:90 2.95E+6mg/L (水溶解度超)</li> <li>● Neutral Organics [MAX LogP=5.00] R<sup>2</sup>:0.88 n:296 3.53E+8mg/L (水溶解度超)</li> </ul>	Reactive unspecified <=1.42E+7mg/L* (水溶解度超)[5.50E+6 - 3.69E+7] (minimum toxicity)	
魚類	急性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能		
	判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Aliphatic Amines [MAX LogP=8.00] R<sup>2</sup>:0.79 n:90 1.44E+6mg/L (水溶解度超)</li> <li>● Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R<sup>2</sup>:0.88 n:296 1.79E+7mg/L (水溶解度超)</li> </ul>				
	慢性	判定不能	有害性クラス外相当	判定不能		



No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8
7	CAS RN 1563-66-2 N-メチルカルバミン酸2,3-ジヒドロ-2,2-ジメチル-7-ベンゾ[b]フラニル  <chem>O=C(NC)Oc1c2c(CC(C)(O2)C)ccc1</chem> 分子量 221.26 水溶解度(実測) 320mg/L 試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類 水溶解度(予測) ※1 353.9mg/L Log P(Kow Win) ※2 2.3 LogBCFmax ※3 1.79 EnergyLUMO ※4 0.07eV 備考:	藻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	有害性クラス3相当 Neutral Organics [MAX LogP=6.40] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 47.61mg/L	Reactive unspecified <=51.10mg/L [5.91 - 442.00] (minimum toxicity)
					● Carbamate Esters, Phenyl [MAX LogP=6.40] R <sup>2</sup> :0.92 n:5 2.59mg/L	
			慢性	判定不能	有害性クラス外相当	
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 13.26mg/L	
		甲殻類	急性	判定不能	有害性クラス1相当	判定不能
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	Neutral Organics [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 56.98mg/L	Reactive unspecified <=67.37mg/L [25.20 - 180.16] (minimum toxicity)
					● Carbamate Esters, Phenyl [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :- n:5 0.00931mg/L	
			慢性	判定不能	有害性クラス2相当	
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 6.0mg/L	
					● Carbamate Esters, Phenyl [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :- n:5 0.0160mg/L	
魚類	急性	判定不能	有害性クラス2相当	判定不能		
		判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	Neutral Organics [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 97.6mg/L	Reactive unspecified <=60.82mg/L [24.71 - 149.70] (minimum toxicity)		
			● Carbamate Esters, Phenyl [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.17 n:23 4.27mg/L			
	慢性	判定不能	有害性クラス3相当			
		判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 9.86mg/L			
			● Carbamate Esters, Phenyl [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.17 n:23 0.408mg/L			

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8
8	CAS RN 98-01-1 フルフラール  <chem>O=CC1=CC=CO1</chem> 分子量 96.09 水溶解度(実測) 74100mg/L 試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類 水溶解度(予測) ※1 53580mg/L Log P(Kow Win) ※2 0.83 LogBCFmax ※3 1.12 EnergyLUMO ※4 -0.45eV 備考:	藻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aldehydes (Mono) [MAX LogP=6.40] R <sup>2</sup> :0.81 n:6 11.13mg/L	Reactive unspecified ≤340.00mg/L [37.60 - 3070] (minimum toxicity)
					Neutral Organics [MAX LogP=6.40] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 214.74mg/L	
			慢性	判定不能	有害性クラス4相当	
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aldehydes (Mono) [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.81 n:6 3.64mg/L	
					Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.68 n:41 44.23mg/L	
		甲殻類	急性	判定不能	有害性クラス4相当	判定不能
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aldehydes (Mono) [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.73 n:14 21.55mg/L	Reactive unspecified ≤642.69mg/L [231.02 - 1788] (minimum toxicity)
					Neutral Organics [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 450.23mg/L	
			慢性	判定不能	有害性クラス3相当	
				判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aldehydes (Mono) [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.73 n:14 0.194mg/L	
					Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.77 n:98 32.52mg/L	
魚類	急性	判定不能	有害性クラス3相当	有害性クラス3相当		
		GNO_X aldehyde normal aromatic R <sup>2</sup> :0.85 Q <sup>2</sup> :0.81 n:19 81mg/L [18 - 370] ※P(LogP適用領域外)	● Aldehydes (Mono) [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.48 n:64 21.14mg/L	Aldehydes R <sup>2</sup> :0.6, n:46 27.38mg/L [8.69 - 86.22]		
			Neutral Organics [MAX LogP=5.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 883.21mg/L			
	慢性	判定不能	有害性クラス4相当			
		判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	● Aldehydes (Mono) [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.48 n:64 5.36mg/L			
			Neutral Organics [MAX LogP=8.00] R <sup>2</sup> :0.88 n:296 76.02mg/L			

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8
9	CAS RN 593-45-3 オクタデカン  <chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCC</chem> 分子量 254.5 水溶解度(実測) 0.006mg/L 試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類 水溶解度(予測) ※1 9.358E-5mg/L Log P(Kow Win) ※2 9.18 LogBCFmax ※3 3.07 EnergyLUMO ※4 3.61eV 備考:	藻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
			急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
		甲殻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
			急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
		魚類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	
			急性	判定不能	判定不能	判定不能
			慢性	判定不能	判定不能	

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8
10	CAS RN 9004-96-0 $\alpha$ -ヒドロ- $\omega$ -(オレオイルオキシ)ポリ(オキシエチレン)  CCCCCC/C=C/CCCCC(OC)O 分子量 326.52 水溶解度(実測) 試験用水への水溶解度 藻類 甲殻類 魚類 水溶解度(予測) ※1 0.02685mg/L Log P(Kow Win) ※2 7.04 LogBCFmax ※3 4.45 EnergyLUMO ※4 1.04eV 備考:EO数1(構造式 n=1)について予測	藻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
				GO_X primary alcohol $R^2: 0.91 Q^2: 0.79 n: 6$ <b>0.00017mg/L</b> [2.2E-6 - 0.014] ※P(LogP適用領域外)	Esters [MAX LogP=6.40] $R^2: 0.79 n: 28$ <b>0.0111mg/L</b> ※w(MAXlogPを超過)	Baseline narcotics $R^2: 0.78, n: 100$ <b>0.011mg/L</b> [0.0012 - 0.11] ※D(ドメイン外)
				CNO_X ester unreactive Alga $R^2: 0.94 Q^2: 0.85 n: 6$ <b>0.007mg/L</b> [0.00030 - 0.16] ※P(LogP適用領域外)	Neutral Organics [MAX LogP=6.40] $R^2: 0.68 n: 41$ <b>0.0367mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	
			判定不能	有害性クラス1相当 (水溶解度情報なし)		
			ester unreactive w/o acid $R^2: 0.88 Q^2: 0.79 n: 9$ <b>0.0014mg/L</b> [0.000031 - 0.064] ※P(LogP適用領域外)	● Esters [MAX LogP=8.00] $R^2: 0.79 n: 28$ <b>0.00542mg/L</b>		
			CNO_X ester unreactive Alga $R^2: 0.9 Q^2: 0.79 n: 8$ <b>0.0015mg/L</b> [0.000033 - 0.068] ※P(LogP適用領域外)	Neutral Organics [MAX LogP=8.00] $R^2: 0.68 n: 41$ <b>0.0271mg/L</b> (水溶解度超)		
		甲殻類	急性	判定不能	判定不能	判定不能
				GO_X primary alcohol $R^2: 0.95 Q^2: 0.76 n: 6$ <b>0.012mg/L</b> [0.0015 - 0.10] ※P(LogP適用領域外)	Esters [MAX LogP=5.00] $R^2: 0.81 n: 47$ <b>0.0580mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	Reactive unspecified <b>&lt;=0.0487mg/L*</b> (水溶解度超)[0.015 - 0.16] (minimum toxicity)
				CNO_X ester unreactive Daphnid $R^2: 0.93 Q^2: 0.86 n: 8$ <b>0.13mg/L</b> (水溶解度超)[0.013 - 1.2] ※P(LogP適用領域外)	Neutral Organics [MAX LogP=5.00] $R^2: 0.77 n: 98$ <b>0.00719mg/L</b> ※w(MAXlogPを超過)	
			判定不能	有害性クラス1相当 (水溶解度情報なし)		
			CNO_X ester unreactive Daphnid $R^2: 0.84 Q^2: 0.73 n: 8$ <b>0.017mg/L</b> [0.00083 - 0.33] ※P(LogP適用領域外)	Esters [MAX LogP=8.00] $R^2: 0.81 n: 47$ <b>0.0194mg/L</b>		
			● Neutral Organics [MAX LogP=8.00] $R^2: 0.77 n: 98$ <b>0.00256mg/L</b>			
魚類	急性	判定不能	判定不能	判定不能		
		GO_X primary alcohol $R^2: 0.92 Q^2: 0.9 n: 22$ <b>0.017mg/L</b> [0.0013 - 0.23] ※P(LogP適用領域外)	Esters [MAX LogP=5.00] $R^2: 0.79 n: 102$ <b>0.0357mg/L</b> (水溶解度超) ※w(MAXlogPを超過)	Esters $R^2: 0.79, n: 26$ <b>0.1986mg/L*</b> (水溶解度超)[0.051 - 0.772] ※D(ドメイン外)		
		CNO_X ester unreactive $R^2: 0.72 Q^2: 0.68 n: 37$ <b>0.055mg/L</b> (水溶解度超)[0.0050 - 0.60] ※P(LogP適用領域外)	Neutral Organics [MAX LogP=5.00] $R^2: 0.88 n: 296$ <b>0.00795mg/L</b> ※w(MAXlogPを超過)			
	判定不能	有害性クラス1相当 (水溶解度情報なし)				
	判断基準(※6)を満たすQSAR式なし	Esters [MAX LogP=8.00] $R^2: 0.79 n: 102$ <b>0.00422mg/L</b>				
	● Neutral Organics [MAX LogP=8.00] $R^2: 0.88 n: 296$ <b>0.00135mg/L</b>					

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値		
				KATE ※6	ECOSAR ※7	TIMES ※8

【物理化学的性状の算出方法】

- ※1 Wskowwin v1.42
- ※2 Kowwin v1.68
- ※3~4 TIMES v2.32

【水溶解度情報の取扱いについて】

○水溶解度(水溶解度試験による溶解度、藻類・甲殻類・魚類試験用水への溶解度)の実測値が得られている場合には、そのうちの最大値と毒性予測値との比較を行った。毒性予測値が水溶解度を超過する場合には、予測値の横に「(水溶解度超)」と示している。  
○水溶解度の実測値が得られていない場合  
有害性クラス判定結果の下に「(水溶解度情報なし)」と示している。  
○水溶解度は参考値として示しており、判定には用いていない。

有害性クラスの判定方法

各QSARモデルにおいて利用可能と判断した予測値に対し、以下の条件より利用可能性を判定し、「種間外挿の不確実性」は考慮せず、「急性慢性毒性比(ACR)」及び「室内試験から野外への外挿係数(=10)を用いて算出したPNECに基づき有害性クラス判定を行った。予測不能もしくは利用不可とされる予測結果しか得られない場合にはセルをグレーで示している。

【※6 KATE2020v.5.1】

資料には統計的指標としてR2(決定係数)  $\geq 0.7$ 、Q2(内部バリデーションの指標)  $\geq 0.5$ 、n(参照物質数)  $\geq 5$ を満たすQSAR式により算出された結果のみを表示している。

○KATEが設定する有効な予測の適用領域から逸脱した予測結果は利用不可とした。

- ※P(logP適用領域外): 予測対象物質のlogPが、当該クラスに含まれる参照物質のlogPの最小値と最大値の間にない、もしくは6を超過しており、回帰式の適用領域外である。
- ※S(構造適用領域外): 予測対象物質の部分構造について、予測物質が分類されるクラス及びNarcotic Group(麻酔作用で毒性を説明可能なクラス)の参照物質の部分構造集合に含まれないため、回帰式の適用領域外である。

○KATEが「(条件付き)適用領域内」としている予測結果は利用可能とした。

- ※c(conditionally): 予測対象物質の部分構造すべてが、該当するQSARクラスの「構造判定用部分構造リスト」に含まれないが、当該QSARクラスの「構造判定用部分構造リスト」及びNarcotic Groupクラスの「構造判定用部分構造リスト」を合わせたリストに含まれる。

予測対象物質が該当するクラスが複数ある場合には、フラグがついていないもしくは※cがついている予測値のうち、最小値に●マークを付けている。

【※7 ECOSAR2.2】

○ECOSARの「特別な毒性学的意義を持つクラス(class of special toxicological significance)」による予測結果は優先的に利用する。

- ※E(特別な毒性を持つクラス): 予測物質が農薬等の特別な毒性を有する物質で構築されているクラス。他のクラスによる予測値が得られている場合でも、本クラスの予測値を利用するのが適切と考えられる。

○ECOSARが「一般的に飽和状態で影響なしと考えられる」とした予測結果は利用可能とした。

- ※w(MAXlogPを超過): QSAR式が規定するMAXlogPを超過している。ECOSARのMethodology documentにおいて、MAXlogPを超過する物質は「一般的に飽和状態で影響なしと考えられる(generally expected to have no effects at saturation)」とされているが、本資料では予測値をそのまま利用している。詳細な検討の際には注意が必要となる。なお、MAX LogPの値は各QSARクラスの横に[MAX LogP=○]として示している。

○ECOSARが慢性毒性予測値を実測値に基づくQSAR式を用いて算出しているのではない場合は、利用不可とした。

- ※A(急性予測値から算出): 慢性毒性予測値を実測値に基づくデータセットを用いて算出しているのではなく、急性毒性予測値からACRを用いて作成した式から算出している。予測対象物質が該当するクラスが複数ある場合には、※Eおよび※wがついていない予測値のうち最小値をもって有害性クラスの判定を行った。有害性クラスの判定に用いた結果には●マークを付けている。

【※8 TIMES v2.32】

○TIMESにおいて反応性不明と判断されたクラスは利用不可とした。

「Reactive Unspecified」クラス

○TIMESが設定する有効な予測の適用領域から逸脱する予測結果は利用不可とした。

- ※D(ドメイン外): 構造もしくは記述子のドメイン(適用領域)から逸脱している。