

QSAR予測結果

利用可のQSAR予測値一覧

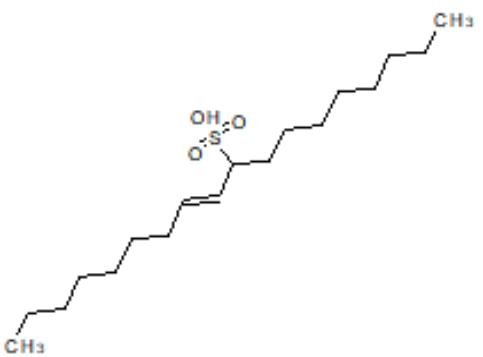
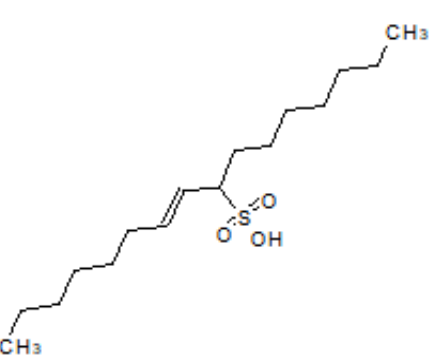
No.	化学物質		毒性値(mg/L)						
	物質名	CAS RN	種類	藻類急性	藻類慢性	甲殻類急性	甲殻類慢性	魚類急性	魚類慢性
1	Octadecene, reaction products with sulfur trioxide, hydrolyzed, potassium salts	2210238-56-3	試験結果	589.6	25.56	4.27	1.94	1.4	データなし
			KATE						
			ECOSAR	3.28 ※	1.83 ※		0.272 ※		0.198 ※
			TIMES						
2	Hexadecene, reaction products with sulfur trioxide, hydrolyzed, potassium salts	2210238-42-7	試験結果	422.66	23.16	19.19	>=9.89	13	データなし
			KATE					9.7 [0.73 - 130]	
			ECOSAR	14.39 ※	6.56 ※	6.9 ※	1.35 ※	9.48 ※	1.24 ※
			TIMES						
3	メチル＝3－(3, 5－ジ－tert－ブチル－4－ヒドロキシフェニル)プロパノアート	6386-38-5	試験結果	2.3	0.5	>100	0.123	5.6	データなし
			KATE	0.77 [0.12 - 4.9]	0.17 [0.018 - 1.6]	1.1 [0.34 - 3.6]			
			ECOSAR	0.263	0.107	0.540	0.0691	0.313	0.0424
			TIMES						
4	アセト酢酸エチル	141-97-9	試験結果	>100	データなし	>100	データなし	>100	データなし
			KATE						
			ECOSAR	698.29	175.01	924.41	87.15	335.61	16.69
			TIMES						
5	{末端に2－シアノブタン－2－イル基を有する、エチル[2－(メタクリロイルオキシ)エチル](ジメチル)アンモニウム＝エチル＝スルファート・2－(ジメチルアミノ)エチル＝メタクリラート共重合物}と2, 2－ジオキソ－1, 2 λ (6)－オキサチオランの反応生成物(分子量1, 000未満の成分の含有率が1%以下であるものに限る。)	MITI番号6-3948	試験結果	>88.3	0.241	>110	データなし	>104	データなし
				分子量1,000以上のため予測せず					
6	メチル＝4－ヒドロキシベンゾアート	99-76-3	試験結果	55.6	16.6	35.8	0.2	59.5	データなし
			KATE	37 [5.4 - 250]	5.4 [0.30 - 100]	12 [2.8 - 53]		24 [3.2 - 180]	
			ECOSAR	21.58	3.89	9.02	0.986	18.44	1.19
			TIMES	61.70 [7.10 - 537.00]					

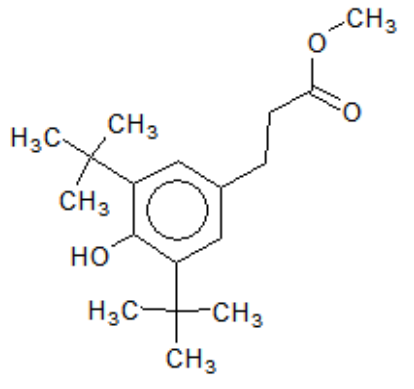
No.	化学物質		毒性値(mg/L)						
	物質名	CAS RN	種類	藻類急性	藻類慢性	甲殻類急性	甲殻類慢性	魚類急性	魚類慢性
7	3, 4-エポキシシクロヘキシルメチル(3, 4-エポキシ)シクロヘキサンカルボキシレート	2386-87-0	試験結果	>110	22	40	データなし	24	データなし
			KATE						
			ECOSAR	19.27	6.11	9.3	6.06	18.17	1.23
			TIMES						
8	α -アルキル(C=6~8、直鎖型)- ω -ヒドロキシポリ(オキシエタン-1, 2-ジイル)(数平均分子量が1,000未満であるものに限る。)	単位検討物質 (27252-75-1)	試験結果	14	5.9	40	データなし	データなし	データなし
			KATE	35 [7.5 - 160]	3.4 [0.50 - 23]	33 [8.8 - 120]	0.37 [0.014 - 9.8]	41 [6.6 - 250]	
			ECOSAR	25.98	7.59	28.48	3.18	47.75	4.95
			TIMES	26.20 [3.04 - 226.00]				100.17 [36.90 - 271.98]	
9	1, 2-ジメチルジスルファン	624-92-0	試験結果	6.7	0.17	5.69	0.0025	1.28	0.473
			KATE						
			ECOSAR	40.05	10.22	56.43	5.33	100.55	9.69
			TIMES						
10	トリメチル(オキシラン-2-イルメチル)アンモニウム＝クロリド	3033-77-0	試験結果	>1000	814	16.4	0.16	1992	データなし
			KATE						
			ECOSAR	8996	1173	6274	1799	826.6	0.117
			TIMES						
11	m-ニトロ安息香酸	121-92-6	試験結果	106.4	データなし	96.7	データなし	>100	データなし
			KATE						
			ECOSAR	31800	4980	1.11E+5	5700	2.47E+5 ※	18400
			TIMES						
12	2, 2-ビス{[(2-ヘキシルデカノイル)オキシ]メチル}プロパン-1, 3-ジイル＝ビス(2-ヘキシルデカノート)	60623-04-3	試験結果	データなし	データなし	>100	データなし	データなし	データなし
			KATE						
			ECOSAR						
			TIMES						
13	ビス(2-モルホリノエチル)＝エーテル	6425-39-4	試験結果	>100	>=100	>100	データなし	>2337.5	データなし
			KATE					6200 [1200 - 32000]	
			ECOSAR	1009	253.84	571	32.26	7041	1326
			TIMES					9456 [2920 - 30620]	

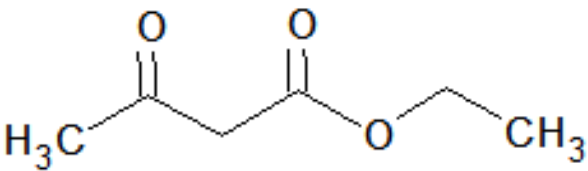
No.	化学物質		毒性値(mg/L)						
	物質名	CAS RN	種類	藻類急性	藻類慢性	甲殻類急性	甲殻類慢性	魚類急性	魚類慢性
14	2-デシルテトラデカン-1-オール	58670-89-6	試験結果	データなし	データなし	データなし	データなし	データなし	データなし
			KATE						
			ECOSAR						
			TIMES						
15	2-クロロフェノール	95-57-8	試験結果	13.01	4.93	1.66	0.08	9.41	4
			KATE	23 [3.5 - 150]	3.3 [0.18 - 60]	8.2 [1.9 - 36]		21 [5.1 - 84]	
			ECOSAR	17.36	2.67	6.35	0.715	13.66	1.37
			TIMES			11.75 [4.22 - 32.76]		20.46 [8.08 - 51.82]	
16	デカン-1, 10-ジオール	112-47-0	試験結果	55	40	57	データなし	109	データなし
			KATE	18 [1.6 - 200]	3.4 [0.13 - 93]	11 [1.4 - 82]	1.1 [0.098 - 13]	41 [5.8 - 280]	0.97 [0.097 - 9.6]
			ECOSAR	18.94	5.76	19.25	2.26	31.69	3.35
			TIMES	18.20 [2.11 - 156.00]		51.87 [18.91 - 142.31]		91.02 [33.37 - 248.28]	
17	ナフタレン-1, 5-ジスルホン酸	81-04-9	試験結果	>100	>100	>1000	データなし	>1000	データなし
			KATE						
			ECOSAR	1.08E+5	15459	4.45E+5	20392	1.03E+6 ※	72916
			TIMES						

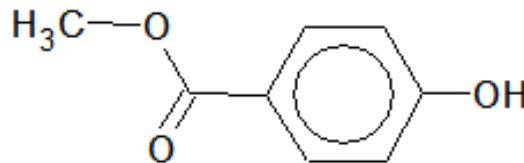
- ・利用可のQSARクラスが複数ある場合は最小の毒性値を記載。
- ・[]内は95%予測区間
- ・毒性値の後ろの※水溶解度超
- ・灰色ハッチは利用可の予測値なし。

QSAR予測結果

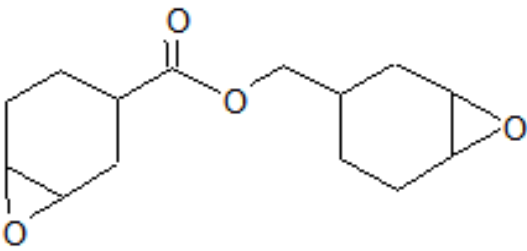
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
1	CAS RN 2210238-56-3 Octadecene, reaction products with sulfur trioxide, hydrolyzed, potassium salts 備考:octadec-10-ene-9-sulfonate(酸)として予測 MW332.53 水溶解度(mg/L) ※10.1116 Log P(Kow Win) ※15.68 Log BCFmaxtox ※34.17 LUMO(eV) ※4-0.77  CCCCCCCC=CC(S(O)(=O)=O)CCCCCCCC	魚類	急性	1.4	利用不可 Reactive unspecified ≤0.145 [0.053 – 0.397] (minimum toxicity)	利用不可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 1.36 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	利用不可 CNOS_X acid unreactive R2:0.77 Q2:0.63 n:12 2.7 [0.16 – 46] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超
			慢性	データなし		利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 0.198 (水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		甲殻類	急性	4.27	利用不可 Reactive unspecified ≤0.0699 [0.022 – 0.218] (minimum toxicity)	利用不可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 1.08 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性	1.94		利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 0.272 (水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		藻類	急性	589.6	利用不可 Reactive unspecified ≤0.15 [0.016 – 1.31] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 3.28 (水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性	25.56		利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 1.83 (水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
	CAS RN 2210238-42-7 Hexadecene, reaction products with sulfur trioxide, hydrolyzed, potassium salts 備考:hexadec-9-ene-8-sulfonate(酸)として予測 MW304.47 水溶解度(mg/L) ※11.128 Log P(Kow Win) ※14.7 Log BCFmaxtox ※33.5 LUMO(eV) ※4-0.74  CCCCCCC=CC(S(O)(=O)=O)CCCCCCC	魚類	急性	13	利用不可 Reactive unspecified ≤0.7305 [0.268 – 1.99] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 9.48 (水溶解度超)	利用可 CNOS_X acid unreactive R2:0.77 Q2:0.63 n:12 9.7 [0.73 – 130] 水溶解度超
			慢性	データなし		利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 1.24 (水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		甲殻類	急性	19.19	利用不可 Reactive unspecified ≤0.4533 [0.155 – 1.32] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 6.9 (水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性	>=9.89		利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 1.35 (水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		藻類	急性	422.66	利用不可 Reactive unspecified ≤0.82 [0.094 – 7.18] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 14.39 (水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性	23.16		利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 6.56 (水溶解度超)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし

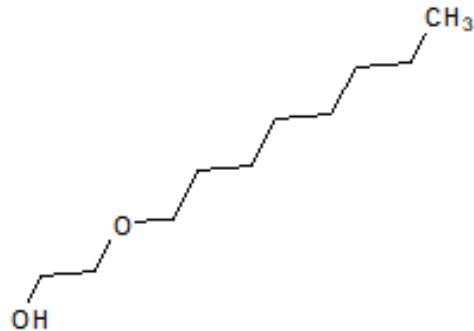
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
3	CAS RN 6386-38-5 メチル＝3－(3, 5－ジ－tert－ブチル－4－ヒドロキシフェニル)プロパノアート 備考: MW 292.4 水溶解度(mg/L) ※1 2.462 Log P(Kow Win) ※1 5.06 Log BCFmaxtox ※3 3.76 LUMO(eV) ※4 0.33  CC(C)(c1c(c(C(C)(C)C)cc(CCC(OC)=O)c1)O)C	魚類	急性	5.6	利用不可 Phenols and anilines R2:0.86, n:93 0.3957 [0.154 – 1.02] ※D(ドメイン外)	利用可 Esters R2:0.79 n:102 0.501 ※w(MAXlogPを超過)	利用不可 CNO_X ester unreactive R2:0.72 Q2:0.68 n:37 0.72 [0.086 – 6.1] ※P(LogP適用領域外)
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 0.428 ※w(MAXlogPを超過)	
						Phenols R2:0.87 n:188 0.313	
		慢性	データなし	/	/	利用可 Esters R2:0.79 n:102 0.0468	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 0.0584	
						● Phenols R2:0.87 n:188 0.0424	
		甲殻類	急性	>100	利用不可 Phenols and anilines R2:0.51 n:49 1.02 [0.333 – 3.13] ※D(ドメイン外)	利用可 Esters R2:0.81 n:47 0.941 ※w(MAXlogPを超過)	利用可 phenol unreactive hindered R2:0.76 Q2:0.64 n:11 1.1 [0.34 – 3.6]
						Neutral Organics R2:0.77 n:98 0.323 ※w(MAXlogPを超過)	
						Phenols R2:0.7 n:63 0.540	
		慢性	0.123	/	/	利用可 Esters R2:0.81 n:47 0.222	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						● Neutral Organics R2:0.77 n:98 0.0691	
						Phenols R2:0.7 n:63 0.101	
		藻類	急性	2.3	利用不可 Baseline narcotics R2:0.78, n:100 0.4 [0.046 – 3.54] ※D(ドメイン外)	● Esters R2:0.79 n:28 0.263	利用可 CNO_X ester unreactive Alga R2:0.96 Q2:0.9 n:6 0.77 [0.12 – 4.9]
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 0.773	
						Phenols R2:0.67 n:40 0.444	

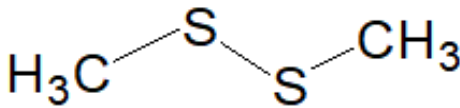
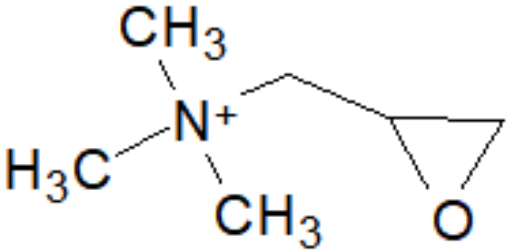
No	化学物質	対象	急性/ 慢性 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
				0.5		● Esters R2:0.79 n:28 0.107	CNO_X ester unreactive Alga R2:0.94 Q2:0.88 n:8 0.17 [0.018 – 1.6]
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 0.380	
						Phenols R2:0.67 n:40 0.136	
4	CAS RN 141-97-9 アセト酢酸エチル 備考: MW 130.14 水溶解度(mg/L) ※1 56170 Log P(Kow Win) ※1 -0.2 Log BCFmaxtox ※3 -0.15 LUMO(eV) ※4 0.41  O=C(OCC)CC(C)=O	魚類	急性	>100	利用不可 Reactive unspecified <=4497 [1644 – 12296] (minimum toxicity)	● Esters R2:0.79 n:102 335.61	判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 10181	
			慢性	データなし		● Esters R2:0.79 n:102 16.69	判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 782.88	
		甲殻類	急性	>100	利用不可 Reactive unspecified <=9617 [3321 – 27848] (minimum toxicity)	● Esters R2:0.81 n:47 924.41	判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.77 n:98 4717	
			慢性	データなし		● Esters R2:0.81 n:47 87.15	判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.77 n:98 261.14	
		藻類	急性	>100	利用不可 Reactive unspecified <=3140 [329.00 – 29900] (minimum toxicity)	● Esters R2:0.79 n:28 698.29	判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 1515	
			慢性	データなし		● Esters R2:0.79 n:28 175.01	判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 252.23	

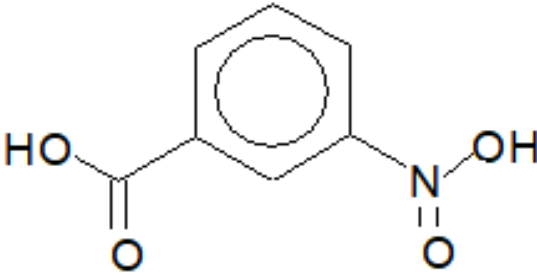
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
5	MITI番号 6-3948 {末端に2-シアノブタン-2-イル基を有する、エチル[2-(メタクリロイルオキシ)エチル](ジメチル)アンモニウム=エチル=スルファート・2-(ジメチルアミノ)エチル=メタクリラート共重合物}と2, 2-ジオキソ-1, 2 λ (6)-オキサチオランの反応生成物(分子量1, 000未満の成分の含有率が1%以下であるものに限る。)	魚類	急性		分子量1,000以上のため予測せず		
6	CAS RN 99-76-3 メチル=4-ヒドロキシベンゾアート 備考: MW152.14 水溶解度(mg/L) ※1 5981 Log P(Kow Win) ※1 2 Log BCFmaxtox ※3 1.49 LUMO(eV) ※4 -0.36  O=C(OC)c1ccc(cc1)O	魚類	急性	59.5	利用不可 Phenols and anilines R2:0.86, n:93 25.28 [9.98 - 64.05] ※D(ドメイン外)	● Esters R2:0.79 n:102 18.44	● CNO_X ester unreactive R2:0.72 Q2:0.68 n:37 24 [3.2 - 180]
					Neutral Organics R2:0.88 n:296 125.85	phenol unreactive unhindered w/o bisphenol, HRAC Ea R2:0.87 Q2:0.86 n:57 32 [7.8 - 130]	
					Phenols R2:0.87 n:188 20.84	phenol unreactive unhindered R2:0.88 Q2:0.87 n:58 32 [7.8 - 130]	
						phenol unreactive unhindered w/o X R2:0.89 Q2:0.88 n:37 36 [11 - 120]	
		甲殻類	慢性	データなし	/	● Esters R2:0.79 n:102 1.19	判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 12.3	
						Phenols R2:0.87 n:188 2.06	
						甲殻類	急性
		Neutral Organics R2:0.77 n:98 71.43	phenol unreactive unhindered R2:0.82 Q2:0.78 n:28 12 [2.8 - 53]				
		● Phenols R2:0.7 n:63 9.02	phenol unreactive unhindered w/o X R2:0.87 Q2:0.83 n:19 15 [4.8 - 46]				
		甲殻類	慢性	0.2	/		
						Neutral Organics R2:0.77 n:98 6.96	

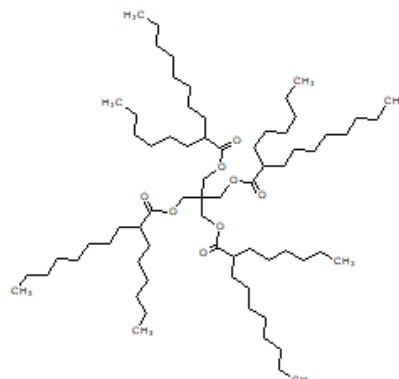
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
		藻類	急性	55.6	利用可 Baseline narcotics R2:0.78, n:100 61.70 [7.10 – 537.00]	Phenols R2:0.7 n:63 ● 0.986	
						利用可	利用可
						● Esters R2:0.79 n:28 21.58	CNO_X ester unreactive Alga R2:0.96 Q2:0.9 n:6 120 [20 – 740]
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 53.14	● phenol unreactive unhindered w/o bisphenol, HRAC Ea R2:0.8 Q2:0.77 n:26 37 [5.4 – 250]
						Phenols R2:0.67 n:40 26.34	
			慢性	16.6		利用可	利用可
						● Esters R2:0.79 n:28 6.61	● phenol unreactive unhindered R2:0.7 Q2:0.64 n:27 5.4 [0.30 – 100]
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 13.91	phenol unreactive unhindered w/o X, bisphenol, HRAC Ea R2:0.72 Q2:0.65 n:18 6 [0.40 – 89]
						● Phenols R2:0.67 n:40 3.89	CNO_X ester unreactive Alga R2:0.94 Q2:0.88 n:8 31 [3.7 – 250]

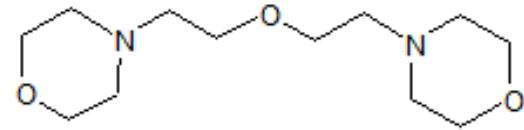
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
7	CAS RN 2386-87-0 3, 4-エポキシシクロヘキシルメチル(3, 4-エポキシ)シクロヘキサンカルボキシレート 備考: MW 252.29 水溶解度(mg/L) ※1 216.7 Log P(Kow Win) ※1 2.37 Log BCFmaxtox ※3 1.77 LUMO(eV) ※4 1.09  O=C(OCC1CC2C(O2)CC1)C3CC4C(O4)CC3	魚類	急性	24	利用不可 Reactive unspecified <=97.54 [36.10 – 263.57] (minimum toxicity)	利用可 ● Esters R2:0.79 n:102 18.17	利用不可 CNO_X ester unreactive R2:0.72 Q2:0.68 n:37 24 [3.2 – 180] ※S(構造適用領域外)
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 96.16	
			慢性	データなし	/	利用可 ● Esters R2:0.79 n:102 1.23	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 9.79	
		甲殻類	急性	40	利用不可 Reactive unspecified <=88.54 [33.45 – 234.41] (minimum toxicity)	利用可 Esters R2:0.81 n:47 41.49	利用不可 CNO_X ester unreactive Daphnid R2:0.93 Q2:0.86 n:8 50 [8.2 – 300] ※S(構造適用領域外)
						Neutral Organics R2:0.77 n:98 56.5	
			慢性	データなし	/	● Epoxides, Poly R2:1 n:2 9.3	
						利用可 Esters R2:0.81 n:47 6.13	利用不可 CNO_X ester unreactive Daphnid R2:0.84 Q2:0.73 n:8 5.9 [0.51 – 68] ※S(構造適用領域外)
			藻類	急性	>110	● Neutral Organics R2:0.77 n:98 6.06	
						Epoxides, Poly R2:1 n:2 0.798 ※A(急性予測値から算出)	
			慢性	22	利用不可 Reactive unspecified <=51.10 [5.91 – 441.00] (minimum toxicity)	利用可 ● Esters R2:0.79 n:28 19.27	利用不可 CNO_X ester unreactive Alga R2:0.96 Q2:0.9 n:6 100 [17 – 580] ※S(構造適用領域外)
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 48.5	
					/	利用可 ● Esters R2:0.79 n:28 6.11	利用不可 CNO_X ester unreactive Alga R2:0.94 Q2:0.88 n:8 25 [3.1 – 200] ※S(構造適用領域外)
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 13.71	

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
8	単位検討物質 CAS RN (27252-75-1) α -アルキル(C=6～8、直鎖型) - ω -ヒドロキシポリ (オキシエタン-1, 2-ジイル)(数平均分子量が1,000未満であるものに限る。) 備考:2-オクチルオキシエタノール(α -ヒドロ- ω -(オクチルオキシ)ポリ(オキシエチレン)EO数1に相当)として予測 MW174.27 水溶解度(mg/L) ※11309 Log P(Kow Win) ※12.53 Log BCFmaxtox ※31.89 LUMO(eV) ※42.73  CCCCCCCCOCCO	魚類	急性	データなし	利用可 Baseline narcotics R2:0.89, n:221 100.17 [36.90 - 271.98]	利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 47.75	利用可 ● CO_X alcohol unreactive w/ EO R2:0.98 Q2:0.97 n:5 41 [6.6 - 250]
							CO_X ether unreactive R2:0.87 Q2:0.86 n:44 51 [4.4 - 580]
							CO_X primary alcohol R2:0.92 Q2:0.9 n:22 70 [7.7 - 640]
			慢性	データなし		利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 4.95	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		甲殻類			急性	40	利用不可 Baseline narcotics R2:0.9 n:30 66.97 [24.92 - 179.99] ※D(ドメイン外)
							● CO_X primary alcohol R2:0.95 Q2:0.76 n:6 33 [8.8 - 120]
			慢性	データなし		利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 3.18	利用可 CO_X ether unreactive R2:0.88 Q2:0.76 n:10 0.37 [0.014 - 9.8]
					藻類	急性	14
				CO_X primary alcohol R2:0.91 Q2:0.79 n:6 44 [2.8 - 680]			
		慢性	5.9			利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 7.59	利用可 CO_X ether unreactive excl. HRAC Ea Alga R2:0.89 Q2:0.86 n:15 3.4 [0.50 - 23]

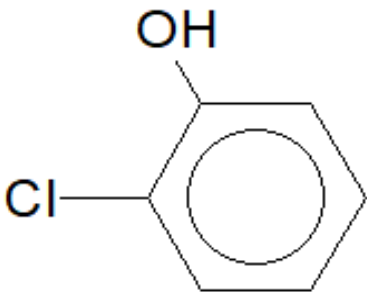
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
9	CAS RN 624-92-0 1, 2-ジメチルジスルファン 備考: MW 94.2 水溶解度(mg/L) ※1 3739 Log P(Kow Win) ※1 1.87 Log BCFmaxtox ※3 1.4 LUMO(eV) ※4 -1.55  CSSC	魚類	急性	1.28	利用不可 Reactive unspecified ≤32.06 [11.74 – 87.54] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 100.55	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性			利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 9.69	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		甲殻類	急性	5.69	利用不可 Reactive unspecified ≤49.89 [17.94 – 138.78] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 56.43	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性			利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 5.33	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		藻類	急性	6.7	利用不可 Reactive unspecified ≤48.10 [5.51 – 419.00] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 40.05	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性			利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 10.22	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		魚類	急性	1992	利用不可 Reactive unspecified ≤5784 [1985 – 16850] (minimum toxicity)	利用可 ● Epoxides, Mono R2:0.95 n:7 826.6	利用不可 n+, N+ R2:0.75 Q2:0.61 n:11 210 [2.0 – 21000] ※S(構造適用領域外)
			慢性			Neutral Organics R2:0.88 n:296 1.06E+5	
10	CAS RN 3033-77-0 トリメチル(オキシラン-2-イルメチル)アンモニウム＝クロリド 備考:カチオン部分について予測 MW 116.18 水溶解度(mg/L) ※1 1000000 Log P(Kow Win) ※1 -1.39 Log BCFmaxtox ※3 -1.04 LUMO(eV) ※4 -4.18  O(C1)C1C[N+](C)(C)C	魚類	急性	データなし	利用不可 Reactive unspecified ≤34852* [8752 – 1.39E+5] (minimum toxicity)	利用可 ● Epoxides, Mono R2:0.95 n:7 0.117	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性			Neutral Organics R2:0.88 n:296 7175	
		甲殻類	急性	16.4	利用不可 Reactive unspecified ≤34852* [8752 – 1.39E+5] (minimum toxicity)	利用可 ● Epoxides, Mono R2:0.97 n:4 6274	利用不可 n+, N+ R2:0.95 Q2:0.89 n:5 33 [0.80 – 1300] ※S(構造適用領域外)
			慢性			Neutral Organics R2:0.77 n:98 44093	
		魚類	急性	0.16	利用不可 Reactive unspecified ≤34852* [8752 – 1.39E+5] (minimum toxicity)	利用可 Epoxides, Mono R2:0.97 n:4 639.84 ※A(急性予測値から算出)	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性			Neutral Organics R2:0.77 n:98 1799	

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
		藻類	急性	>1000	利用不可 Reactive unspecified ≤25400* [2450 – 2.64E+5] (minimum toxicity)	利用可 Epoxides, Mono R2:0.98 n:3 15699	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						● Neutral Organics R2:0.68 n:41 8996	
			慢性	814		利用可 Epoxides, Mono R2:0.98 n:3 3352	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						● Neutral Organics R2:0.68 n:41 1173	
11	CAS RN 121-92-6 m-ニトロ安息香酸 備考: MW 169.13 水溶解度(mg/L) ※1 170500 Log P(Kow Win) ※1 -0.51 Log BCFmaxtox ※3 0.62 LUMO(eV) ※4 -0.93  O=N(O)c1cccc(C(=O)O)c1	魚類	急性	>100	利用不可 Reactive unspecified ≤515.78 [188.72 – 1410] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 2.47E+5 (水溶解度超)	利用不可 CNOS_X acid unreactive R2:0.77 Q2:0.63 n:12 8000 [520 – 130000] ※P(LogP適用領域外)
			慢性	データなし		利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 18400	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		甲殻類	急性	96.7	利用不可 Reactive unspecified ≤986.45 [348.71 – 2790] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 1.11E+5	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性	データなし		利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 5700	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
		藻類	急性	106.4	利用不可 Reactive unspecified ≤597.00 [66.00 – 5400] (minimum toxicity)	利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 31800	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性	データなし		利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 4980	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし

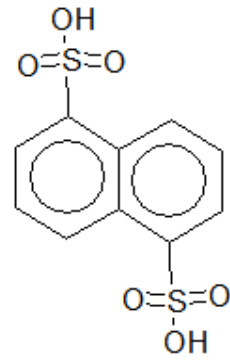
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
12	CAS RN 60623-04-3 2, 2-ビス[[(2-ヘキシルデカノイル)オキシ]メチル]プロパン-1, 3-ジイル=ビス(2-ヘキシルデカノアート) 備考: MW 1089.73 水溶解度(mg/L) ※1 8.71E-26 Log P(Kow Win) ※1 28.06 Log BCFmaxtox ※3 -11.01 LUMO(eV) ※4 1.05  O=C(C(CCCCCC)CCCCCCCC)OCC(COC(C(CCCCCC)CCCCCCCC)=O)(COC(C(CCCCCC)CCCCCCCC)=O)COC(C(CCCCCC)CCCCCCCC)=O	魚類	急性	データなし	利用不可	利用不可	利用不可
					Esters R2:0.79, n:26 2.07E+13* [8.18E+11 - 5.24E+14] ※D(ドメイン外)	Esters R2:0.79 n:102 2.46E-14 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	CNO_X ester unreactive R2:0.72 Q2:0.68 n:37 7.3E-14 [4.1E-17 - 1.3E-10] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超
			慢性	データなし		Neutral Organics R2:0.88 n:296 3.56E-21 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	
						利用不可	利用不可
						Esters R2:0.79 n:102 3.61E-14 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 5.94E-21 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	
		甲殻類	急性	>100	利用不可	利用不可	利用不可
					Reactive unspecified <=1.00E+11* [1.00E+11 - 1.00E+11] (minimum toxicity)	Esters R2:0.81 n:47 8.68E-15 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	CNO_X ester unreactive Daphnid R2:0.93 Q2:0.86 n:8 2.7E-13 [5.0E-17 - 1.5E-9] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超
			慢性	データなし		Neutral Organics R2:0.77 n:98 2.24E-20 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	
						利用不可	利用不可
						Esters R2:0.81 n:47 1.14E-13 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	CNO_X ester unreactive Daphnid R2:0.84 Q2:0.73 n:8 5.8E-14 [3.0E-19 - 1.1E-8] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超
						Neutral Organics R2:0.77 n:98 1.77E-18 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	
藻類	急性	データなし	利用不可	利用不可	利用不可		
			Baseline narcotics R2:0.78, n:100 4.30E-19 [±2.00E-21] ※D(ドメイン外)	Esters R2:0.79 n:28 3.16E-17 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	CNO_X ester unreactive Alga R2:0.96 Q2:0.9 n:6 6.8E-19 [9.0E-24 - 5.1E-14] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超		
	慢性	データなし		Neutral Organics R2:0.68 n:41 3.49E-16 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)			
				利用不可	利用不可		
Esters R2:0.79 n:28 1.05E-16 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)	CNO_X ester unreactive Alga R2:0.94 Q2:0.88 n:8 5.1E-20 [8.4E-25 - 3.1E-15] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超						
Neutral Organics R2:0.68 n:41 1.94E-14 ※w (MAXlogPを超過)(水溶解度超)(MW>1000)							

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
13	CAS RN 6425-39-4 ビス(2-モルホリノエチル)＝エーテル 備考: MW 244.32 水溶解度(mg/L) ※1 1000000 Log P(Kow Win) ※1 -1.31 Log BCFmaxtox ※3 -0.98 LUMO(eV) ※4 2.37  N1(CCOCCN2CCOCC2)CCOCC1	魚類	急性	>2337.5	利用可 Narcotic amines R2:0.86, n:55 9456 [2920 - 30620]	利用可 ● Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 7041	利用可 CNO_X amine sec,tert unreactive aliphatic R2:0.91 Q2:0.86 n:16 6200 [1200 - 32000]
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 1.89E+5	
		慢性	データなし	データなし		利用可 ● Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 1326	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 12904	
		甲殻類	急性	>100	利用不可 Reactive unspecified <=3.29E+5 [1.09E+5 - 9.92E+5] (minimum toxicity)	利用可 ● Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 571	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.77 n:98 79187	
		慢性	データなし	データなし		利用可 ● Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 32.26	利用不可 CNO_X amine sec,tert unreactive w/ N-Oxide,Nitroso R2:0.81 Q2:0.74 n:15 140 [8.1 - 2300] ※P(LogP適用領域外)
						Neutral Organics R2:0.77 n:98 3297	
		藻類	急性	>100	利用不可 Narcotic Amines R2:0.64, n:14 308.00 [36.70 - 2590] ※D(ドメイン外)	利用可 ● Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 1009	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 16657	
		慢性		>=100		利用可 ● Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 253.84	利用不可 CNO_X amine sec,tert unreactive w/ N-Oxide,Nitroso R2:0.72 Q2:0.65 n:21 440 [5.9 - 33000] ※P(LogP適用領域外)
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 2208	CNO_X amine sec,tert unreactive aliphatic R2:0.9 Q2:0.79 n:6 660 [40 - 11000] ※P(LogP適用領域外)

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
14	CAS RN 58670-89-6 2-デシルテトラデカン-1-オール 備考: MW354.63 水溶解度(mg/L) ※10.000017 Log P(Kow Win) ※110.59 Log BCFmaxtox ※32.02 LUMO(eV) ※43.39  <chem>CCCCCCCCCCCC(CO)CCCCCCCCC</chem>	魚類	急性	データなし	利用不可 Baseline narcotics R2:0.89, n:221 193.36* [70.88 – 527.51] ※D(ドメイン外)	利用不可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 5.63E-6 ※w(MAXlogPを超過)	利用不可 narcotic group Fish Acute R2:0.87 Q2:0.87 n:154 0.00001 [1.2E-6 – 0.000085] ※P(LogP適用領域外) CO_X alcohol unreactive w/o EO Fish R2:0.89 Q2:0.88 n:46 0.000013 [8.1E-7 – 0.00022] ※P(LogP適用領域外) CO_X primary alcohol R2:0.92 Q2:0.9 n:22 0.000017 [6.6E-7 – 0.00042] ※P(LogP適用領域外)
			慢性	データなし	利用不可	利用不可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 1.40E-6 ※w(MAXlogPを超過)	利用不可 narcotic group Fish Chronic R2:0.82 Q2:0.75 n:12 4.3E-6 [8.3E-8 – 0.00022] ※P(LogP適用領域外)
		甲殻類	急性	データなし	利用不可 Baseline narcotics R2:0.9 n:30 110.51* [40.29 – 303.10] ※D(ドメイン外)	利用不可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 7.06E-6 ※w(MAXlogPを超過)	利用不可 CO_X primary alcohol R2:0.95 Q2:0.76 n:6 0.000016 [3.9E-7 – 0.00070] ※P(LogP適用領域外) narcotic group Daphnid Acute R2:0.71 Q2:0.7 n:83 0.0001 [8.4E-6 – 0.0012] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X alcohol unreactive w/o EO Daphnid R2:0.78 Q2:0.72 n:14 0.00018 [1.8E-6 – 0.017] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超
			慢性	データなし	利用不可	利用不可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 6.26E-6 ※w(MAXlogPを超過)	利用不可 narcotic group Daphnid Chronic R2:0.7 Q2:0.68 n:74 0.000044 [2.5E-6 – 0.00078] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X alcohol unreactive w/o EO Daphnid R2:0.82 Q2:0.75 n:14 0.00014 [2.6E-6 – 0.0077] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超
		藻類	急性	データなし	利用不可 Baseline narcotics R2:0.78, n:100 0.000017* [1.30E-6 – 0.00023] ※D(ドメイン外)	利用不可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 1.40E-4 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	利用不可 CO_X primary alcohol R2:0.91 Q2:0.79 n:6 6.3E-9 [2.4E-12 – 0.000016] ※P(LogP適用領域外) CO_X alcohol unreactive w/o halogen,acid,EO R2:0.95 Q2:0.9 n:6 1.9E-8 [6.8E-11 – 5.5E-6] ※P(LogP適用領域外) narcotic group Alga Acute R2:0.76 Q2:0.74 n:52 1.5E-6 [7.2E-8 – 0.000033] ※P(LogP適用領域外)
		藻類	慢性	データなし	利用不可	利用不可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 2.14E-4 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	利用不可 CO_X alcohol unreactive w/o halogen,acid,EO R2:0.87 Q2:0.81 n:10 2.3E-8 [3.6E-11 – 0.000014] ※P(LogP適用領域外)

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
15	CAS RN 95-57-8 2-クロロフェノール 備考: MW 128.55 水溶解度(mg/L) ※1 5165 Log P(Kow Win) ※1 2.16 Log BCFmaxtox ※3 1.61 LUMO(eV) ※4 0.03  Clc1c(cccc1)O	魚類	急性	9.41	利用可 Phenols and anilines R2:0.86, n:93 20.46 [8.08 – 51.82]	利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 76.28	利用可 ● phenol unreactive unhindered R2:0.88 Q2:0.87 n:58 21 [5.1 – 84]
						● Phenols R2:0.87 n:188 13.66	● phenol unreactive unhindered w/o bisphenol, HRAC Ea R2:0.87 Q2:0.86 n:57 21 [5.1 – 84]
			慢性	4		利用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 7.59	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						● Phenols R2:0.87 n:188 1.37	
		甲殻類	急性	1.66	利用可 Phenols and anilines R2:0.51 n:49 11.75 [4.22 – 32.76]	利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 43.95	利用可 ● phenol unreactive unhindered R2:0.82 Q2:0.78 n:28 8.2 [1.9 – 36]
						● Phenols R2:0.7 n:63 6.35	phenol unreactive unhindered w/o bisphenol, HRAC Ea R2:0.8 Q2:0.76 n:27 8.3 [1.9 – 36]
			慢性	0.08		利用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 4.46	利用不可 判断基準を満たすQSAR式なし
						● Phenols R2:0.7 n:63 0.715	
		藻類	急性	13.01	利用不可 Baseline narcotics R2:0.78, n:100 38.70 [4.47 – 336.00] ※D(ドメイン外)	利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 34.76	利用可 phenol unreactive unhindered w/o bisphenol, HRAC Ea R2:0.8 Q2:0.77 n:26 23 [3.5 – 150]
						● Phenols R2:0.67 n:40 17.36	
			慢性	4.93		利用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 9.4	利用可 phenol unreactive unhindered R2:0.7 Q2:0.64 n:27 3.3 [0.18 – 60]
						● Phenols R2:0.67 n:40 2.67	

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
16	CAS RN 112-47-0 デカン-1, 10-ジオール 備考: MW 174.27 水溶解度(mg/L) ※1 274 Log P(Kow Win) ※1 2.73 Log BCFmaxtox ※3 2.04 LUMO(eV) ※4 3.42  OCCCCCCCCCO	魚類	急性	109	Baseline narcotics R2:0.89, n:221 91.02 [33.37 – 248.28]	Neutral Organics R2:0.88 n:296 31.69	● narcotic group Fish Acute R2:0.87 Q2:0.87 n:154 41 [5.8 – 280]
							CO_X primary alcohol R2:0.92 Q2:0.9 n:22 47 [5.1 – 430]
							CO_X alcohol unreactive w/o EO Fish R2:0.89 Q2:0.88 n:46 65 [7.9 – 530]
			慢性	データなし		Neutral Organics R2:0.88 n:296 3.35	利用可 narcotic group Fish Chronic R2:0.82 Q2:0.75 n:12 0.97 [0.097 – 9.6]
		甲殻類	急性	57	Baseline narcotics R2:0.9 n:30 51.87 [18.91 – 142.31]	Neutral Organics R2:0.77 n:98 19.25	● narcotic group Daphnid Acute R2:0.71 Q2:0.7 n:83 11 [1.4 – 82]
							CO_X primary alcohol R2:0.95 Q2:0.76 n:6 23 [6.3 – 81]
							CO_X alcohol unreactive w/o EO Daphnid R2:0.78 Q2:0.72 n:14 28 [1.5 – 510]
			慢性	データなし		Neutral Organics R2:0.77 n:98 2.26	● narcotic group Daphnid Chronic R2:0.7 Q2:0.68 n:74 1.1 [0.098 – 13]
							CO_X alcohol unreactive w/o EO Daphnid R2:0.82 Q2:0.75 n:14 2.1 [0.14 – 32]
		藻類	急性	55	Baseline narcotics R2:0.78, n:100 18.20 [2.11 – 156.00]	Neutral Organics R2:0.68 n:41 18.94	● CO_X alcohol unreactive w/o halogen,acid,EO R2:0.95 Q2:0.9 n:6 18 [1.6 – 200]
							CO_X primary alcohol R2:0.91 Q2:0.79 n:6 25 [1.7 – 350]
							narcotic group Alga Acute R2:0.76 Q2:0.74 n:52 32 [4.3 – 240]
			慢性	40		Neutral Organics R2:0.68 n:41 5.76	CO_X alcohol unreactive w/o halogen,acid,EO R2:0.87 Q2:0.81 n:10 3.4 [0.13 – 93]

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
17	CAS RN 81-04-9 ナフタレンー1, 5ージスルホン酸 備考: MW 288.29 水溶解度(mg/L) ※1 90520 Log P(Kow Win) ※1 -0.94 Log BCFmaxtox ※3 -0.7 LUMO(eV) ※4 -1.95  O=S(c1c2cccc(S(=O)(O)=O)c2ccc1)(O)=O	魚類	急性	>1000	利用不可	利用可	利用不可
					Reactive unspecified <=15779 [5630 – 44218] (minimum toxicity)	Neutral Organics R2:0.88 n:296 1.03E+6 (水溶解度超)	CNOS_X acid unreactive R2:0.77 Q2:0.63 n:12 25000 [1400 – 440000] ※P(LogP適用領域外)
			慢性	データなし		利用可	利用不可
						Neutral Organics R2:0.88 n:296 72916	判断基準を満たすQSAR式なし
		甲殻類	急性	>1000	利用不可	利用可	利用不可
					Reactive unspecified <=58542 [17483 – 1.96E+5] (minimum toxicity)	Neutral Organics R2:0.77 n:98 4.45E+5	判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性	データなし		利用可	利用不可
						Neutral Organics R2:0.77 n:98 20392	判断基準を満たすQSAR式なし
		藻類	急性	>100	利用不可	利用可	利用不可
					Reactive unspecified <=27100 [2700 – 2.71E+5] (minimum toxicity)	Neutral Organics R2:0.68 n:41 1.08E+5	判断基準を満たすQSAR式なし
			慢性	>100		利用可	利用不可
						Neutral Organics R2:0.68 n:41 15459	判断基準を満たすQSAR式なし

【物理化学的性状の算出方法】

※1 Wskowwin v1.43

※2 実測値

※3～5 TIMES v2.30

【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)の予測値(実測値が得られている場合は実測値)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、フラグ欄に「(水溶解度超)」と示している。

有害性クラスの付与方法

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 TIMES v2.30.1.11】

○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。

【※8 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、MAXlogPの値は各QSARクラスの横に[MAXlogP=○]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に●マークを付けている。

【※9 KATE2020v.4.1】

資料には統計的指標としてR2(決定係数)≥0.7、Q2(内部バリデーションの指標)≥0.5、n(参照物質数)≥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。