

別紙1 収集情報の評価結果【詳細】

分類	収集された個別情報					個別情報の品質評価			情報の統合			分類毎の情報の統合			全ての情報の統合					
	情報の種類	情報源の詳細 (実験データの情報源、 QSARモデル名等)	結果 番号	結果の要約 (試験法・GLP・分解度等)	備考 (変化物等)	信頼性 ランク	関連性 ランク	妥当性 ランク	情報の 一貫性	証拠の 強さ	不確実性	情報の 一貫性	証拠の 強さ	不確実性	情報の 一貫性	証拠の 強さ	不確実性			
易分解性	実測	事業者提供情報 ²	1	(OECD TG301A、OECD GLP、28日) DOC removal: 94 %	-	1A	High	High	-	中程度- 強い	低い (妥当性の高い 易分解性試験結 果がある。)	あり (実測、 類推、 QSAR)	中程度- 強い	低い (妥当性の高い 易分解性試験及 び多数の易分解 性類似物質から の類推の結果等 に基づく。)	あり	中程度- 強い	低い (妥当性の高い 易分解性試験を 含む複数の試験 及び多数の易分 解性類似物質か らの類推の結果等 に基づく。)			
		事業者提供情報	-	(中国 TG301F ^{*1} 、非GLP ^{*3} 、28日) BOD: 73.65 %	-	3	-	-	-	-	-									
	類推	類似物質1~13に基づく類推	※別紙2 参照	易分解性	-	2B	High	High	-	中程度- 強い	低い (易分解性と十 分に判断できる類 似物質からの類 推。)									
	QSAR (分解度)	CATALOGIC 301C v.11.15	-	BOD: 40 % 親物質残留率: 0 %	代謝マップに複数の変化物あり。	-	-	N.A.	-	弱い	高い (利用可能な QSARは1モデル のみ。)									
		CATALOGIC Kinetic 301F v.13.16	-	BOD: 41 % 親物質残留率: 0 %	代謝マップに複数の変化物あり。	-	-	N.A.												
		CATALOGIC Kinetic 301B v.02.09	-	CO ₂ : 54 % 親物質残留率: 0 %	代謝マップに複数の変化物あり。	-	-	N.A.												
	QSAR (定性)	Danish QSAR v.1	-	易分解性	-	-	-	Low												
		BIOWIN5 v.4.10	-	難分解性	-	-	-	N.A.												
		BIOWIN6 v.4.10	-	難分解性	-	-	-	N.A.												
		VEGA Ready Biodegradation model v.1.0.10	-	Possible Readily Biodegradable	-	-	-	N.A.												
本質的 分解性	実測	事業者提供情報 ³	2	(中国 TG302C ^{*2} 、非GLP ^{*3} 、28日) BOD: 96.7 % UPLC-MS: 97.5 %	-	2A	Mid ^{*4}	Mid				-	中程度	高い (信頼性ランク 2Aの1試験の み。)	-	中程度	高い (信頼性ランク 2Aの1試験の み。)	あり (易分解性、本 質的分解性、そ の他)	中程度- 強い	低い (妥当性の高い 易分解性試験を 含む複数の試験 及び多数の易分 解性類似物質か らの類推の結果等 に基づく。)
	類推	-	-	-	-	-	-	-				-	-							
	QSAR	-	-	-	-	-	-	-				-	-							
シミュレ ーション	実測	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-			
	類推	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-			
	QSAR (半減期)	VEGA Persistence (sediment) quantitative model v.1.0.1	-	予測不可	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
		VEGA Persistence (soil) quantitative model v.1.0.1	-	23 days	-	-	-	N.A.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
VEGA Persistence (water) quantitative model v.1.0.1	-	予測不可	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-			
その他	実測	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-			
	類推	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-			
	QSAR (生分解速度 /半減期)	BIOWIN3 v.4.10	-	易分解性	-	-	-	Mid	あり	弱い- 中程度	高い (究極分解予測 はBIOWIN3の1 モデルのみ。)									
		BIOWIN4 v.4.10	-	易分解性	-	-	Mid													
	BioHCwin v.1.01a	-	予測不可	-	-	-	-													
QSAR (非生物的分解性)	CATALOGIC Abiotic 301C v.01.07	-	親物質残留率: 0 %	複数の変化物あり。	-	-	Low													
QSAR (嫌氣的生分解性)	BIOWIN7 v.4.10	-	易分解性	-	-	-	N.A.													

サポート情報は薄青色 (□)。評価に用いていないデータは灰色 (□)。N.A.はNot Appropriateの略。データがない場合は「-」。

*1 中国 TG301F: 中国化学品テストガイドライン No.301F (GB/T 21801-2008 : 化学品 快速生物降解性 呼吸計量法試験)

*2 中国 TG302C: 中国化学品テストガイドライン No.302C (GB/T 21818-2008 : 化学品 固有生物降解性 改良的MITI試験(II))

*3 中国 GLP (HJ/T 155-2004 : 化学物質試験合格実験室導則) 準拠

*4 試験法がOECDテストガイドライン及びそれに準じたテストガイドラインでない場合であって、植種源が明確になっていない点を含め総合評価を実施。