

評価物質のQSAR予測結果

使用可のQSAR予測値一覧

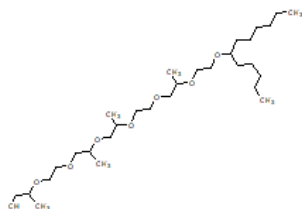
No.	物質名	CAS RN	種類	毒性値(mg/L)					
				藻類急性	藻類慢性	甲殻類急性	甲殻類慢性	魚類急性	魚類慢性
1	α-アルキル(C=6~18)-ω-ヒドロキシポリ[オキシエタン-1,2-ジイル/オキシ(メチルエタン-1,2-ジイル)](数平均分子量が1,000未満であるものに限る。)	単位検討物質	試験結果	11.8	3.2	1.58	データなし	1.8	データなし
			KATE	1.3 ※ [0.057-29]	0.88 ※ [0.087-8.9]	2 ※ [0.16-25]	0.02 [0.00023-1.7]	6.8 ※	
			ECOSAR	6.49 ※	2.66 ※	3.80 ※	0.65 ※	5.48 ※	0.68 ※
			TIMES						
2	[α-(1-オキソアルキル(C=8~18、直鎖型))-ω-メチルポリ(オキシエタン-1,2-ジイル)]又はα-(1-オキソアルケニル(C=8~18、直鎖型))-ω-メチルポリ(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	試験結果	12.1	0.254	15.8	2.4	30.2	6.18
			KATE	58 ※ [7.2-470]	14 ※ [1.3-160]	47 ※ [6.4-350]	5.4 ※ [0.34-86]	21 ※	
			ECOSAR	11.61 ※	4.24 ※	32.42 ※	16.21 ※	17.52 ※	1.05 ※
			TIMES						
3	エチレンジアミン四酢酸のナトリウム塩	単位検討物質	試験結果	6.9	0.368	>115	6.33	>115	>=29.6
			KATE						
			ECOSAR	757962 ※	154007	238783 ※	10116	3.96E+06 ※	1.84E+06 ※
			TIMES						
4	[2-ヒドロキシ-N-(2-ヒドロキシエチル)-N,N-ジメチルエタン-1-アミニウム(又は2-ヒドロキシ-N-(2-ヒドロキシプロピル)-N,N-ジメチルプロパン-1-アミニウム)と飽和脂肪酸(C=10~18、直鎖型)又は不飽和脂肪酸(C=18、直鎖型)とのエステル化反応生成物]の塩	単位検討物質	試験結果	1.2	0.39	6.7	1	5.2	0.686
			KATE			0.067 [0.00038-12]		0.34 [0.0027-42]	
			ECOSAR	0.85 ※	0.48	2.95 ※	0.996 ※	1.84 ※	8.29E-02
			TIMES						
5	α, α-トレハロース	MIT18-674	試験結果	データなし	5.42	>100	データなし	データなし	データなし
			KATE						
			ECOSAR	1.79E+07 ※	1.01E+06 ※	4.19E+08 ※	5.97E+08 ※	1.47E+09 ※	6.37E+07 ※
			TIMES						
6	α-アルケニル(C=3、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未満のものに限る。)	単位検討物質	試験結果	データなし	データなし	>10000	データなし	>10000	データなし
			KATE					5000 [380-67000]	
			ECOSAR	985.76	396.44	1097.99		189.02	
			TIMES						
7	ドデシルベンゼンスルホン酸カリウム	27177-77-1	試験結果	データなし	データなし	3.5	データなし	データなし	データなし
			KATE					11 ※ [0.66-170]	
			ECOSAR	15.10 ※	6.89 ※	7.19 ※	1.41 ※	9.86 ※	1.29 ※
			TIMES						
8	エチレンジアミン四酢酸のカリウム塩	単位検討物質	試験結果	6.78	0.361	>113	6.22	>113	>=29
			KATE						
			ECOSAR	757962 ※	154007	238783 ※	10116	3.96E+06 ※	1.84E+06 ※
			TIMES						

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
9	エチレンジアミン四酢酸の鉄錯体のナトリウム	単位検討物質	試験結果	>76.4	>=76.4	100.9	データなし	>100	データなし
			KATE						
			ECOSAR	757962 ※	154007	238783 ※	10116	3.96E+06 ※	1.84E+06 ※
			TIMES						
10	4, 4'-ビス[2-ソジウムスルファニル-4-ジ(ヒドロキシエチル)アミノ-1, 3, 5-トリアジニル-(6)-アミノ]スチルベン-2, 2'-ジスルホン酸ナトリウム	16470-24-9	試験結果	>1000	500	>113	10	>1000	データなし
			KATE						
			ECOSAR						
			TIMES						
11	2-メチルプロパン酸エチル	97-62-1	試験結果	238	50	>100	データなし	データなし	データなし
			KATE	140 [14-1300]	36 [3.0-430]	56 [7.5-420]	6.1 [0.34-110]	26	
			ECOSAR	19.80	4.72	44.89	32.77	21.08	1.66
			TIMES						
12	フタル酸ジノニル	28553-12-0	試験結果	>88	>=88	>0.06	>=0.004	>0.1	データなし
			KATE						
			ECOSAR						
			TIMES						
13	3-アミノプロピルトリエトキシシラン	919-30-2	試験結果	>1000	133	331	データなし	>934	データなし
			KATE						
			ECOSAR	0.98	2.61	10.01	0.78	7.58	6.15
			TIMES						
14	エチル=メチル=カルボナート	MIT12-3698	試験結果	>62	>=62	>100	データなし	>100	データなし
			KATE						
			ECOSAR	95.98	16.26	184.27	181.82	77.33	7.60
			TIMES						

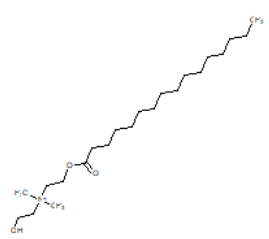
- ・使用可のQSARクラスが複数ある場合は最小の毒性値を記載。
- ・[]内は95%予測区間
- ・毒性値の後ろの※水溶解度超
- ・灰色ハッチは使用可の予測値なし。

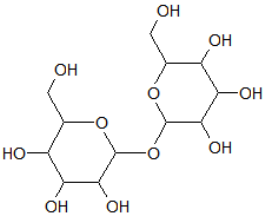
評価物質のQSAR予測結果

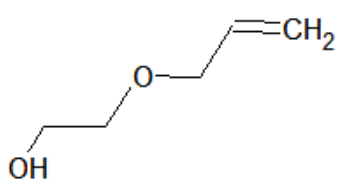
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
1	CAS RN 単位検討物質 α-アルキル(C=6~18)-ω-ヒドロキシポリ[オキシエタン-1,2-ジイル/オキシ(メチルエタン-1,2-ジイル)](数平均分子量が1,000未満であるものに限る。) 備考: CAS RN 68551-13-3 (secC12)、EO=PO=4について予測。 MW 594.83 水溶解度(mg/L) ※1 0.1539 Log P(Kow Win) ※1 4.17 Log BCFmaxtox ※3 3.11 LUMO(eV) ※4 2.13	魚類	急性	1.8	使用不可	使用可	使用可
					basesurface narcotics	Neutral Organics R2:0.88 n:296 5.48 (水溶解度超)	primary alcohol 9.7 [0.88-110] 水溶解度超
					11.8717 [9.004-15.653] ※D(ドメイン外)		● CO_X ether unreactive 6.8 [0.53-88] 水溶解度超
					CO_X alcohol unreactive w/ EO 5.9 [0.41-86] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超		
				使用可	使用不可		
			データなし	Neutral Organics R2:0.88 n:296 0.68 (水溶解度超)	No applicable result		
		甲殻類	急性	1.58	使用不可	使用可	使用可
					basesurface narcotics R2: n: 5.5542 [2.224-13.872] ※D(ドメイン外)	Neutral Organics R2:0.77 n:98 3.80 (水溶解度超)	CO_X ether unreactive 2 [0.16-25] 水溶解度超
			慢性	データなし	使用可	使用可	
				Neutral Organics R2:0.77 n:98 0.65 (水溶解度超)	CO_X ether unreactive 0.02 [0.00023-1.7]		
		藻類	急性	11.8	使用不可	使用可	使用可
					Baseline narcotics R2:0.78, n:100 4.26 [0.49-36.8] ※D(ドメイン外)	Neutral Organics R2:0.68 n:41 6.49 (水溶解度超)	● primary alcohol 1.3 [0.057-29] 水溶解度超
慢性	データなし		使用可	使用可			
	Neutral Organics R2:0.68 n:41 2.66 (水溶解度超)		CO_X ether unreactive excl HRAC Alga 4.6 [0.78-27] 水溶解度超				
			CO_X ether unreactive excl HRAC Alga 0.88 [0.087-8.9] 水溶解度超				

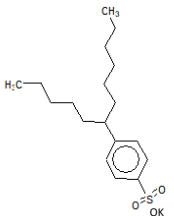


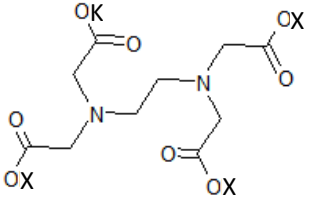
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)				
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7	
3	CAS RN 単位検討物質 エチレンジアミン四酢酸のナトリウム塩 備考:酸として予測 MW 292.23 水溶解度(mg/L) ※1 2.28E+05 Log P(Kow Win) ※1 -3.86 Log BCFmaxtox ※3 0.96 LUMO(eV) ※4 0.43  X= Na or H <chem>O=C(CN(CCN(C(C(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)C(=O)O</chem>	魚類	急性	>115	使用不可 Reactive unspecified <=9.518E+06* [4.767E+06-1.901E+07] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 3.96E+06 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result	
			慢性	>=29.6		使用可 Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 1.84E+06 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result	
			甲殻類	急性	>115	使用不可 Reactive unspecified R2: n: <=5.756E+07* [6.642E+06-4.988E+08] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 238783 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result
				慢性	6.33		使用可 Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 10116	使用不可 No applicable result
		藻類	急性	6.9	使用不可 Reactive unspecified <=6.22E+06* [4.76E+05-8.13E+07] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 757962 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result	
			慢性	0.368		使用可 Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 154007	使用不可 No applicable result	

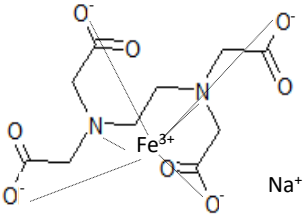
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7
4	CAS RN 単位検討物質 [2-ヒドロキシ-N-(2-ヒドロキシエチル)-N,N-ジメチルエタン-1-アミニウム(又は2-ヒドロキシ-N-(2-ヒドロキシプロピル)-N,N-ジメチルプロパン-1-アミニウム)と飽和脂肪酸(C=10~18、直鎖型)又は不飽和脂肪酸(C=18、直鎖型)とのエステル化反応生成物]の塩 備考: CAS RN 1079184-43-2 (ビス(2-ヒドロキシエチル)(ジメチル)アンモニウムと脂肪酸(C=16~18及び不飽和C=18)のエステルの塩化物)、C16 monoester cationについて予測 MW 372.59 水溶解度(mg/L) ※1 0.7027 Log P(Kow Win) ※1 4.45 Log BCFmaxtox ※3 3.32 LUMO(eV) ※4 -3.88  <chem>C(=O)(CCCCCCCCCCCCC)OCC[N+](C)(C)CCO</chem>	魚類	急性	5.2	Reactive unspecified $\leq 0.3407 * [0.201-0.577]$ (minimum toxicity)	Esters R2:0.79 n:102 1.84 (水溶解度超)	n+, N+ 0.34 [0.0027-42]
			慢性	0.686		Esters R2:0.79 n:102 8.29E-02	CNO_X ester unreactive 2.1 [0.25-18] ※S(構造適用領域外)
		甲殻類	急性	6.7	Reactive unspecified R2: n: $\leq 0.3846 * [0.112-1.324]$ (minimum toxicity)	Esters R2:0.81 n:47 2.95 (水溶解度超)	n+, N+ 0.067 [0.00038-12]
			慢性	1		Esters R2:0.81 n:47 0.996 (水溶解度超)	CNO_X ester unreactive 5 [0.61-41] ※S(構造適用領域外)水溶解度超 CNO_X ester unreactive Daphnid 5.1 [0.53-50] ※S(構造適用領域外)水溶解度超
		藻類	急性	1.2	Reactive unspecified $\leq 1.59 * [0.18-13.8]$ (minimum toxicity)	Esters R2:0.79 n:28 0.85 (水溶解度超)	CNO_X ester unreactive Alga 3 [0.34-26] ※S(構造適用領域外)水溶解度超
			慢性	0.39		Esters R2:0.79 n:28 0.48	CNO_X ester unreactive Alga 0.69 [0.057-8.4] ※S(構造適用領域外)水溶解度超

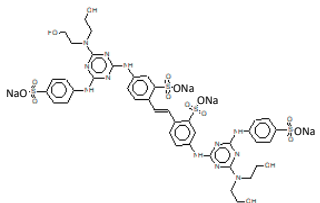
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)				
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7	
5	CAS RN MITI8-674 α, α-トレハロース 備考: MW 342.28 水溶解度(mg/L) ※1 1.00E+06 Log P(Kow Win) ※1 -5.48 Log BCFmaxtox ※3 0.96 LUMO(eV) ※4 1.44  <chem>OC(C(C(C(CO)O)O)O)C1OC2C(C(C(C(CO)O)O)O)O</chem>	魚類	急性	データなし	使用不可 basesurface narcotics 3.56948E+08* [1.576E+08-8.085E+08] ※D(ドメイン外)	使用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 1.47E+09 (水溶解度超)	使用不可 primary alcohol 1.00E+09 [5.0E+07-2.1E+10] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X ether unreactive 7.60E+08 [3.3E+07-1.7E+10] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X alcohol unreactive w/o EO Fish 3.80E+09 [2.7E+08-5.3E+10] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 narcotic group Fish Acute 1.70E+09 [2.0E+08-1.5E+10] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超	
			慢性	データなし		使用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 6.37E+07 (水溶解度超)	使用不可 narcotic group Fish Chronic 1.50E+06 [4600-4.8E+08] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超	
			甲殻類	急性	>100	使用不可 basesurface narcotics R2: n: 2.924E+09* [2.129E+08-4.016E+10] ※D(ドメイン外)	使用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 4.19E+08 (水溶解度超)	使用不可 CO_X ether unreactive 1.30E+09 [2.8E+06-5.7E+11] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X alcohol unreactive w/o EO Daphnid 1.90E+08 [220000-1.7E+11] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X alcohol unreactive w/o EO Daphnid 4.90E+07 [400000-6.1E+09] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 narcotic group Daphnid Acute 9.40E+06 [660000-1.3E+08] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超
				慢性	データなし		使用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 5.97E+08 (水溶解度超)	使用不可 CO_X ether unreactive 4.50E+08 [340000-5.8E+11] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X alcohol unreactive w/o EO Daphnid 220000 [2600-1.8E+07] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超
		藻類	急性	データなし	使用不可 Baseline narcotics R2:0.78, n:100 1.48E+08* [9.339E+07-2.35E+09] ※D(ドメイン外)	使用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 1.79E+07 (水溶解度超)	使用不可 primary alcohol 1.10E+12 [6.1E+06-2.0E+17] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X ether unreactive excl HRAC Alga	

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
						5.20E+08 [5.6E+06-4.9E+10] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X alcohol unreactive w/o halogen, 1.70E+11 [5.0E+07-5.9E+14] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 narcotic group Alga Acute 6.80E+09 [1.4E+08-3.4E+11] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超	
			慢性	5.42		使用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 1.01E+06 (水溶解度超)	使用不可 CO_X ether unreactive excl HRAC Alga 2.30E+06 [50000-1.1E+08] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超 CO_X alcohol unreactive w/o halogen, 4.90E+09 [2.9E+06-8.2E+12] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超
6	CAS RN 単位検討物質 α -アルケニル(C=3、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 未満のものに限る。) 備考:CAS RN 27274-31-3。EO=1について予測 MW 102.13 水溶解度(mg/L) ※1 4.54E+05 Log P(Kow Win) ※1 -0.06 Log BCFmaxtox ※3 1.00 LUMO(eV) ※4 1.07  OCCOCC=C	魚類	急性	>10000	使用不可 Reactive unspecified <=3673.2466 [2751.558-4903.674] (minimum toxicity)	使用可 Vinyl/Allyl/Propargyl Ethers R2:0.95 n:7 189.02	使用可 CO_X ether unreactive 5000 [380-67000]
			慢性	データなし		使用不可 Vinyl/Allyl/Propargyl Ethers R2:0.95 n:7 19.21 ※A(急性予測値から算出)	使用不可 No applicable result
		甲殻類	急性	>10000	使用不可 Reactive unspecified R2: n: <=6724.8477 [2978.491-15183.388] (minimum toxicity)	使用可 Vinyl/Allyl/Propargyl Ethers R2:0.9 n:6 1097.99	使用不可 CO_X ether unreactive 3100 [120-83000] ※P+(LogP適用領域外)
			慢性	データなし		使用不可 Vinyl/Allyl/Propargyl Ethers R2:0.9 n:6 109.82 ※A(急性予測値から算出)	使用不可 CO_X ether unreactive 150 [2.1-11000] ※P+(LogP適用領域外)
		藻類	急性	データなし	使用不可 Reactive unspecified <=1890 [200-17900] (minimum toxicity)	使用可 Vinyl/Allyl/Propargyl Ethers R2:1 n:2 985.76	使用不可 CO_X ether unreactive excl HRAC Alga 3400 [340-34000] ※P+(LogP適用領域外)
			慢性	データなし		使用可 Vinyl/Allyl/Propargyl Ethers R2:1 n:2 396.44	使用不可 CO_X ether unreactive excl HRAC Alga 130 [11-1500] ※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
7	CAS RN 27177-77-1 ドデシルベンゼンスルホン酸カリウム 備考:KATEおよびTIMESは酸として予測。ECOSARはNa塩として予測。 MW 326.48 水溶解度(mg/L) ※1 0.8126 Log P(Kow Win) ※1 4.71 Log BCFmaxtox ※3 3.51 LUMO(eV) ※4 -0.83  <chem>O=S(=O)(c1ccc(G(CCCCC)(CCCCC))(cc1))O</chem>	魚類	急性	データなし	使用不可 Reactive unspecified <=0.7462 [0.566-0.984] (minimum toxicity)	使用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 9.86 (水溶解度超)	使用可 CNOS_X acid general 11 [0.66-170] 水溶解度超
			慢性	データなし		使用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 1.29 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result
		甲殻類	急性	3.5	使用不可 Reactive unspecified R2: n: <=0.4649 [0.174-1.242] (minimum toxicity)	使用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 7.19 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result
			慢性	データなし		使用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 1.41 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result
		藻類	急性	データなし	使用不可 Reactive unspecified <=0.86 [0.098-7.5] (minimum toxicity)	使用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 15.10 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result
			慢性	データなし		使用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 6.89 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result

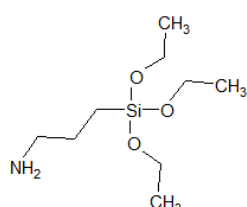
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)				
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7	
8	CAS RN 単位検討物質 エチレンジアミン四酢酸のカリウム塩 備考:酸として予測 MW 292.23 水溶解度(mg/L) ※1 2.28E+05 Log P(Kow Win) ※1 -3.86 Log BCFmaxtox ※3 0.96 LUMO(eV) ※4 0.43  X= K or H <chem>O=C(CN(CCN(C(C(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)C(=O)O</chem>	魚類	急性	>113	使用不可 Reactive unspecified <=9.518E+06* [4.767E+06-1.901E+07] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 3.96E+06 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result	
			慢性	>=29		使用可 Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 1.84E+06 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result	
			甲殻類	急性	>113	使用不可 Reactive unspecified R2: n: <=5.756E+07* [6.642E+06-4.988E+08] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 238783 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result
				慢性	6.22		使用可 Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 10116	使用不可 No applicable result
			藻類	急性	6.78	使用不可 Reactive unspecified <=6.22E+06* [4.76E+05-8.13E+07] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 757962 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result
				慢性	0.361		使用可 Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 154007	使用不可 No applicable result

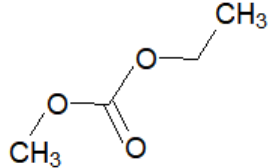
No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)				
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6	KATE ※7	
9	CAS RN 単位検討物質 エチレンジアミン四酢酸の鉄錯体のナトリウム塩 備考:酸として予測 MW 292.23 水溶解度(mg/L) ※1 2.28E+05 Log P(Kow Win) ※1 -3.86 Log BCFmaxtox ※3 0.96 LUMO(eV) ※4 0.43  <chem>O=C(CN(CCN(CC(O)=O)CC(O)=O)CC(O)=O)O)O</chem>	魚類	急性	>100	使用不可 Reactive unspecified $\leq 9.518E+06$ [4.767E+06-1.901E+07] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 3.96E+06 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result	
			慢性	データなし		使用可 Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 1.84E+06 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result	
			甲殻類	急性	100.9	使用不可 Reactive unspecified R2: n: $\leq 5.756E+07$ [6.642E+06-4.988E+08] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 238783 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result
				慢性	データなし		使用可 Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 10116	使用不可 No applicable result
			藻類	急性	>76.4	使用不可 Reactive unspecified $\leq 6.22E+06$ [4.76E+05-8.13E+07] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 757962 (水溶解度超)	使用不可 No applicable result
				慢性	>=76.4		使用可 Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 154007	使用不可 No applicable result

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
10	CAS RN 16470-24-9 4, 4'-ビス[2-ソジウムスルファニル-4-ジ(ヒドロキシエチル)アミノ-1, 3, 5-トリアジニル-(6)-アミノ]スチルベン-2, 2'-ジスルホン酸ナトリウム 備考:KATEおよびTIMESは酸として予測 MW 1077.07 水溶解度(mg/L) ※1 7.01E-05 Log P(Kow Win) ※1 1.34 Log BCFmaxtox ※3 1.28 LUMO(eV) ※4 -1.32  <chem>c1cc(S(=O)(=O)O)ccc1Nc2nc(N(CCO)CCO)nc(n2)Nc3cc(S(=O)(=O)O)c(cc3)C=Cc4c(S(=O)(=O)O)cc(cc4)Nc5nc(N(CCO)CCO)nc(n5)Nc6ccc(S(=O)(=O)O)cc6</chem>	魚類	急性	>1000	使用不可 Reactive unspecified <=933.1643 [650.788-1338.064] (minimum toxicity)	使用不可 Triazines, Aromatic R2:0.58 n:23 17300.00 (水溶解度超)MW>1000	使用不可 CNOS_X acid general 2900 [230-38000] ※S(構造適用領域外)水溶解度超
			慢性	データなし		使用不可 Triazines, Aromatic R2:0.58 n:23 1310.00 (水溶解度超)MW>1000	使用不可 No applicable result
		甲殻類	急性	>113	使用不可 Reactive unspecified R2: n: <=1737.9890 [734.746-4111.090] (minimum toxicity)	使用不可 Triazines, Aromatic R2:0.37 n:9 6340.00 (水溶解度超)MW>1000	使用不可 CNOS_X aromatic n unreactive Daphnid 570 [67-4800] ※S(構造適用領域外)水溶解度超
			慢性	10		使用不可 Triazines, Aromatic R2:0.37 n:9 486.00 (水溶解度超)MW>1000	使用不可 CNOS_X aromatic n unreactive 44 [1.5-1300] ※S(構造適用領域外)水溶解度超 CNOS_X aromatic n unreactive Daphnid 45 [2.0-1000] ※S(構造適用領域外)水溶解度超
		藻類	急性	>1000	使用不可 Reactive unspecified <=1490 [168-13200] (minimum toxicity)	使用不可 Triazines, Aromatic R2:0.21 n:12 33.70 (水溶解度超)MW>1000	使用不可 No applicable result
			慢性	500		使用不可 Triazines, Aromatic R2:0.21 n:12 147.00 (水溶解度超)MW>1000	使用不可 No applicable result

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
11	CAS RN 97-62-1 2-メチルプロパン酸エチル 備考: MW 116.15 水溶解度(mg/L) ※1 3172 Log P(Kow Win) ※1 1.77 Log BCFmaxtox ※3 1.48 LUMO(eV) ※4 1.22  <chem>O=C(OCC)C(C)C</chem>	魚類	急性	データなし	esters R2:0.79, n:26 35.9847 [19.993-64.768] ※D(ドメイン外)	Esters R2:0.79 n:102 21.08	CNO_X ester unreactive 26 [3.2-210]
			慢性	データなし		Esters R2:0.79 n:102 1.66	No applicable result
		甲殻類	急性	>100	Reactive unspecified R2: n: <=141.3542 [95.429-209.380] (minimum toxicity)	Esters R2:0.81 n:47 44.89	● CNO_X ester unreactive 56 [7.5-420]
			慢性	データなし		Esters R2:0.81 n:47 32.77	CNO_X ester unreactive Daphnid 59 [6.7-520]
			急性	238	Baseline narcotics R2:0.78, n:100 71.4 [8.16-625] ※D(ドメイン外)	Esters R2:0.79 n:28 19.80	CNO_X ester unreactive Alga 140 [14-1300]
			慢性	50		Esters R2:0.79 n:28 4.72	CNO_X ester unreactive Alga 36 [3.0-430]

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 28553-12-0 フタル酸ジノニル 備考: MW 418.59 水溶解度(mg/L) ※1 2.32E-05 Log P(Kow Win) ※1 9.37 Log BCFmaxtox ※3 2.93 LUMO(eV) ※4 -0.74  <chem>O=C(c1ccccc1C(=O)OCCCCCCC(C)C)OCCCCCCC(C)C</chem>	魚類	急性	>0.1	esters R2:0.79, n:26 2.4719* [1.206-5.065] ※D(ドメイン外)	esters R2:0.79 n:102 2.76E-3 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	CNO_X ester unreactive 0.003 [0.00017-0.051] ※P+(LogP適用領域外) 水溶解度超	
			慢性	データなし		esters R2:0.79 n:102 4.42E-5 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	No applicable result	
			甲殻類	急性	>0.06	Reactive unspecified R2: n: <=3.1931* [1.463-6.970] (minimum toxicity)	esters R2:0.81 n:47 2.61E-3 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	CNO_X ester unreactive 0.0077 [0.00035-0.17] ※P+(LogP適用領域外) 水溶解度超 CNO_X ester unreactive Daphnid 0.0076 [0.00027-0.21] ※P+(LogP適用領域外) 水溶解度超
				慢性	>=0.004		esters R2:0.81 n:47 2.14E-4 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	CNO_X ester unreactive Daphnid 0.0011 [0.000014-0.085] ※P+(LogP適用領域外) 水溶解度超
		藻類	急性	>88	Baseline narcotics R2:0.78, n:100 0.00019* [1.6E-5-0.0023] ※D(ドメイン外)	esters R2:0.79 n:28 3.45E-4 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	CNO_X ester unreactive Alga 0.00034 [6.8E-6-0.017] ※P+(LogP適用領域外) 水溶解度超	
			慢性	>=88		esters R2:0.79 n:28 9.70E-4 ※w(MAXlogPを超過)(水溶解度超)	CNO_X ester unreactive Alga 6.3E-05 [1.2E-06-0.0033] ※P(LogP適用領域外) 水溶解度超	

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 919-30-2 3-アミノプロピルトリエトキシシラン 備考: MW 221.36 水溶解度(mg/L) ※1 1.22E+04 Log P(Kow Win) ※1 1.51 Log BCFmaxtox ※3 1.04 LUMO(eV) ※4 1.26  NCCC[Si](OCC)(OCC)OCC	魚類	急性	>934	使用不可 Reactive unspecified <=4240.9678 [3299.786-5450.599] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 88.85 ● Alkoxy Silanes R2:0.95 n:4 7.58	使用不可 amine primary unreactive NH2 =1 100 [13-770] ※S(構造適用領域外)	
			慢性	データなし	/	使用可 Aliphatic Amines R2:0.79 n:90 6.15 Alkoxy Silanes R2:0.95 n:4 0.53 ※A(急性予測値から算出)	使用不可 No applicable result	
			甲殻類	急性	331	使用不可 Reactive unspecified R2: n: <=6798.5176 [3432.621-13464.882] (minimum toxicity)	使用可 ● Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 10.01 Alkoxy Silanes R2:0.32 n:6 12.51	使用不可 No applicable result
				慢性	データなし	/	使用可 Aliphatic Amines R2:0.76 n:24 0.78 Alkoxy Silanes R2:0.32 n:6 0.404 ※A(急性予測値から算出)	使用不可 No applicable result
		藻類	急性	>1000	使用不可 Reactive unspecified <=2050 [221-19000] (minimum toxicity)	使用可 Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 9.24 ● Alkoxy Silanes R2:0.43 n:3 0.98	使用不可 No applicable result	
				慢性	133	/	使用可 Aliphatic Amines R2:0.78 n:35 2.94 ● Alkoxy Silanes R2:0.43 n:3 2.61	使用不可 No applicable result

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 MITI2-3698 エチル＝メチル＝カルボナート 備考: MW 104.1 水溶解度(mg/L) ※1 2.73E+04 Log P(Kow Win) ※1 0.72 Log BCFmaxtox ※3 1.1 LUMO(eV) ※4 1.3  <chem>O=C(OC)OCC</chem>	魚類	急性	>100	esters R2:0.79, n:26 180.5002 [76.566-425.522] ※D(ドメイン外)	Esters R2:0.79 n:102 77.33	No applicable result	
			慢性	データなし		Esters R2:0.79 n:102 7.60	No applicable result	
			甲殻類	急性	>100	Reactive unspecified R2: n: <=1328.8423 [757.098-2332.356] (minimum toxicity)	Esters R2:0.81 n:47 184.27	No applicable result
				慢性	データなし		Esters R2:0.81 n:47 181.82	No applicable result
		藻類	急性	>62	Baseline narcotics R2:0.78, n:100 448 [49.3-4070] ※D(ドメイン外)	Esters R2:0.79 n:28 95.98	No applicable result	
			慢性	>=62		Esters R2:0.79 n:28 16.26	No applicable result	

No	化学物質	対象	急性/ 慢性	毒性値(mg/L)		
				試験結果	TIMES ※5	ECOSAR ※6

【物理化学的性状の算出方法】

※1 Wskowwin v1.43

※2 実測値

※3~5 TIMES v2.29

【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。

有害性クラスの判定方法

各QSARモデルにおいて使用可能と判断した予測値に対し、以下の条件より使用可能性を判定した。予測不能もしくは使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 v2.29.1.88】

○TIMESにおいて反応性不明と判断されたクラスは使用不可とした。

「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使用不可とした。

※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 ECOSAR2.0】

○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使用する。

※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に該当する構造を含む場合、他に該当するクラスがあったとしても、当該クラスの参照物質近似していると考えられる。

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

※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使用しており、詳細な検討の際には注意が必要となる。

○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、使用不可とした。

※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または※Eがついていないクラスのみの方は予測値のうち最小値に●マークを付けている。

【※9 KATE2020v.3.0】

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使用不可とした。

※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。

※P+(logP適用領域外): 予測物質のlogPが、予測物質が分類されるクラスの参照物質のlogP集合から外れており、回帰式の有効範囲外である。ただし、予測物質のlogPはSuuport Chemicals*と参照物質を合わせた全物質のlogPの最大値・最小値の内側に存在する。

* KATE2020では ① logP推定値>6.0の化学物質データ ② 不等号付きデータ ③ 外れ値 をSuuport Chemicalsとして参考情報扱いとし、QSARモデル構築には使用していない。

※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使用可能とした。

※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がっている予測値のうち、最小値に●マークを付けている。