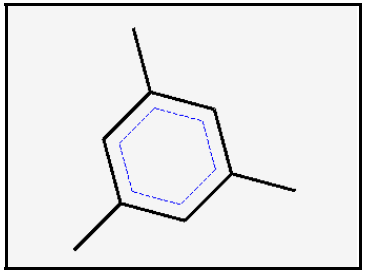
QSARQSAR予測結果　片側優先　1．今回新たに有害性クラスの付与を行う物質（候補）

資料3－4参考

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
33	**片側1** CAS番号 **108-67-8** 1，3，5－トリメチルベンゼン 備考:  分子量 120.2 対水溶解(mg/L) [予測値] 120.3 ※1 logP(KowWin) 3.635 ※2 logBCFmaxtox 2.71E+0 ※3 LUMO(eV) 5.67E-1～5.67E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 3.68 mg/L ※D;判定不能（適用範囲外）	使用可 Neutral Organics 3.36 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 5.00 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 2.48 mg/L ※D;判定不能（適用範囲外）	使用可 Neutral Organics 2.22 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 1.90 mg/L

予測値の選択
QSARクラス複数該当の場合は、下記の順番で条件に合う予測結果（〇印付記）を用いることが望ましい。
・※P,※F,※D,※N(使用不能)が無いクラスの予測結果
・※f（使用留意)が無いクラスの予測結果(KATEのみ)
・より限定されたクラスの予測結果
・Neutral Organicsクラス以外の予測結果
・予測値がより小さいクラスの予測結果
また、予測結果の信頼性が低い以下のクラスは使用不可とした
・TIMES : Reactive Unspecified
・KATE : Unclassified
・ECOSAR: Baseline toxicity, Baseline toxicity(acid)
(※Baseline toxicity(acid)クラスの予測値は物質のイオン化による毒性の減少に鑑み、Baseline toxicityの予測結果を調整係数10で除した値である)

※1 Wskowwin v1.42により算出
※2 KowWin v1.68により算出
※3～7 TIMES v2.27.15 により算出. 魚類エンドポイント: Pimephales Promelas 96h LC50. 甲殻類エンドポイント: Daphnia Magna 48h EC50.
量子化学計算はコンフォマーの生成は行わず、MOPAC（AM1 PRECISE ）により実行。
LUMO : the energy of the lowest unoccupied molecular orbital
BCFmaxtox : the maximum bioconcentration factor
ODDI: the donor delocalizability of the aldehyde O-atom
QC : the charge of the C atom from α, β - unsaturated alcohols
※8 ECOSAR v1.11により算出. 魚類エンドポイント: Fish 96h LC50. 甲殻類エンドポイント: Daphnid 48h LC50. logPはKowWin※2を使用.
すべてのクラスにおいてbaseline toxicityとしてNeutral organicクラスに適用された結果も予測される。
※9 KATE on PAS により算出. 魚類エンドポイント: Fish 96h LC50. 甲殻類エンドポイント: Daphnid 48h EC50.logPはKowWin※2を使用.

※P: 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。＜使用不可＞
※D: Out of Domain (TIMES) ＜使用不可＞
※N: Not Related to an Existing ECOSAR Class Definition (ECOSAR)＜使用不可＞
※F: 予測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NeutralOrganicsクラス（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、回帰式の適用範囲外である。(KATE)＜使用不可＞
※f: 予測物質の部分構造について、予測物質が分類されるクラスの参照物質に含まれない部分構造を持つが、当該部分構造はNeutralOrganicsクラス（単純な麻酔作用のみで毒性が説明される）の参照物質の部分構造集合に含まれるため、予測結果の使用においては部分構造について 留意する必要がある。(KATE)＜使用留意＞