

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

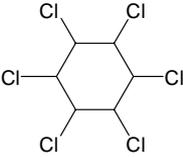
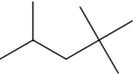
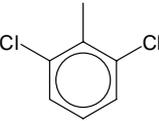
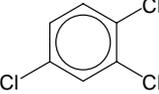
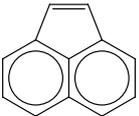
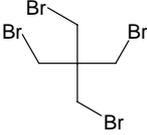
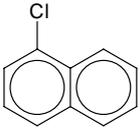
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
17	608-73-1	ヘキサクロロシクロヘキサン		291	2.78	3.99	4.26	8	9.6
18	540-84-1	2, 2, 4-トリメチルペンタン		114	2.71	-	4.09	0.56	8.9
19	118-69-4	2, 6-ジクロロトルエン		161	2.71	4.27	3.83	26	8.7
20	141-93-5	m-ジエチルベンゼン		134	2.69	4.44	4.07	24	10.8
21	120-82-1	1, 2, 4-トリクロロベンゼン		181	2.65	-	3.93	37.9	9.5
22	208-96-8	アセナフチレン		152	2.60	3.93	3.94	16	9.4
23	3229-00-3	1, 3-ジブromo-2, 2-ビス(ブromoメチル)プロパン		388	2.52	3.99	4.06	1.6	8.8
24	90-13-1	1-クロロナフタレン		163	2.42	3.90	3.81	22.4	9.4

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

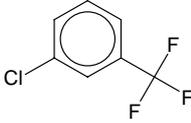
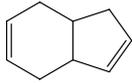
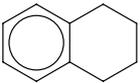
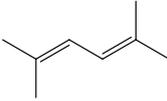
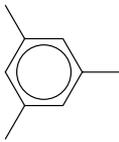
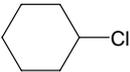
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
25	98-15-7	m-トリフルオロ メチルクロロベンゼン		181	2.37	2.14	3.60	33	9.2
26	3048-65-5	3a, 4, 7, 7a- テトラヒドロ- 1H-インデン		120	2.37	3.83	3.28	49	8.7
27	402-31-3	メタキシレン ヘキサフルオリド		214	2.36	3.87	3.92	28	9.8
28	119-64-2	テトラヒドロナフタリン		132	2.35	3.61	3.96	47	9.4
29	764-13-6	2, 5-ジメチルヘキ サー2, 4-ジエン		110	2.30	3.50	3.95	32	9.8
30	108-67-8	1, 3, 5-トリメチル ベンゼン		120	2.30	3.61	3.63	47.9	8.8
31	542-18-7	クロロシクロヘキサン		119	2.29	3.38	3.36	500	8.4
32	108-87-2	メチルシクロヘキサン		98	2.27	3.87	3.59	15.1	8.1

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

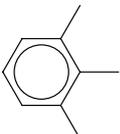
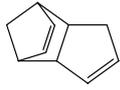
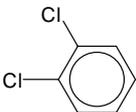
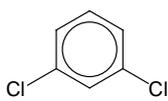
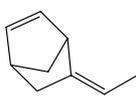
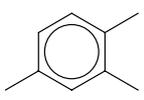
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
33	526-73-8	1, 2, 3-トリメチル ベンゼン		120	2.27	3.63	3.63	57	8.8
34	77-73-6	ジシクロペンタジエン		132	2.27	3.62	3.16	20	8.7
35	106-37-6	p-ジブロモベンゼン		236	2.23	3.85	3.77	12	10.1
36	100-40-3	4-ビニル-1- シクロヘキセン		108	2.22	3.93	3.73	50	9.6
37	95-50-1	o-ジクロロベンゼン		147	2.18	3.66	3.28	100	8.3
38	541-73-1	m-ジクロロベンゼン		147	2.17	3.63	3.28	75	8.7
39	16219-75-3	5-エチリデン-2- ノルボルネン		120	2.03	3.82	3.67	8.9	9.0
40	95-63-6	1, 2, 4-トリメチル ベンゼン		120	1.97	3.55	3.63	57	9.0

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

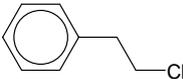
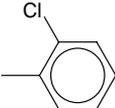
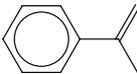
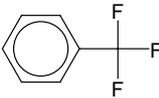
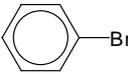
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
41	91-20-3	ナフタリン		128	1.92	3.30	3.17	31.7	9.4
42	106-46-7	p-ジクロロベンゼン		147	1.84	3.41	3.28	49	9.5
43	622-24-2	(2-クロロエチル)ベンゼン		141	1.73	2.96	3.29	210	10.6
44	95-49-8	o-クロロトルエン		127	1.70	3.42	3.18	374	8.3
45	106-43-4	パラクロロトルエン		127	1.68	3.33	3.18	100	9.2
46	98-83-9	α-メチルstyレン		118	1.65	3.48	3.44	100	9.4
47	98-08-8	ベンゾトリフルオライド		146	1.63	3.16	2.96	140	8.5
48	108-86-1	ブロモベンゼン		157	1.36	2.99	2.88	100	8.7

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

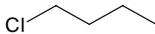
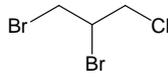
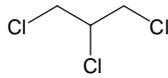
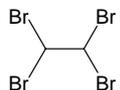
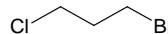
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [A]
49	109-69-3	1-クロロブタン		93	1.15	2.73	2.56	370	8.9
50	108-90-7	モノクロロベンゼン		113	1.05	3.03	2.64	495	8.3
51	96-12-8	1, 2-ジブロモ-3-クロロプロパン		236	0.94	2.96	2.68	300	8.4
52	96-18-4	1, 2, 3-トリクロロプロパン		147.4	0.90	2.27	2.5	900	8.0
53	79-27-6	1, 1, 2, 2-テトラブロモエタン		346	0.68	3.03	2.55	680	8.2
54	109-70-6	1-ブロモ-3-クロロプロパン		157	0.49	2.23	2.41	2100	9.0

Table2 トレーニングセット(Dmax が 8 Å 未満の化審法既存化学物質(23 物質))

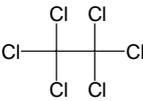
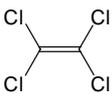
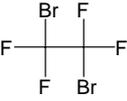
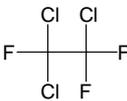
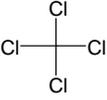
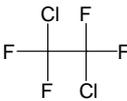
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
55	67-72-1	ヘキサクロロエタン		237	1.45	4.27	4.03	50	7.6
56	127-18-4	テトラクロロエチレン		166	1.72	3.66	2.97	150	7.6
57	110-82-7	シクロヘキサン		84	2.00	3.44	3.18	49	7.2
58	124-73-2	1, 2-ジブromo-1, 1, 2, 2-テトラフルオロエタン		260	1.51	3.22	2.96	3	7.3
59	76-13-1	1, 1, 2-トリクロロ-1, 1, 2-トリフルオロエタン		187	1.30	2.97	3.09	120	6.9
60	110-83-8	シクロヘキセン		82	1.50	2.93	2.96	160	7.2
61	56-23-5	四塩化炭素		154	0.83	2.83	2.44	800	6.2
62	76-14-2	1, 2-ジクロロ-1, 1, 2, 2-テトラフルオロエタン		171	1.32	2.79	2.78	130	7.0

Table2 トレーニングセット(Dmax が 8 Å 未満の化審法既存化学物質(23 物質)) [続き]

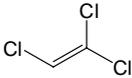
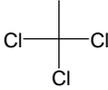
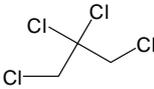
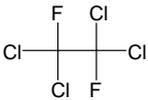
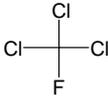
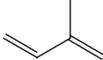
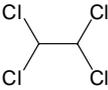
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
63	79-01-6	トリクロロエチレン		131	1.03	2.73	2.47	1100	7.6
64	71-55-6	1, 1, 1-トリクロロエタン		133	0.36	2.72	2.68	4400	6.4
65	13116-53-5	1, 2, 2, 3-テトラクロロプロパン		182	1.52	2.72	3.42	480	7.6
66	76-12-0	1, 1, 2, 2-テトラクロロ-1, 2-ジフルオロエタン		204	1.78	2.56	3.41	160	7.7
67	75-69-4	トリクロロフルオロメタン		137	1.26	2.54	2.13	1300	6.2
68	75-25-2	トリブロモメタン		253	1.14	2.54	1.79	1000	6.8
69	78-79-5	イソブレン		68	1.00	2.42	2.58	300	7.7
70	79-34-5	1, 1, 2, 2-テトラクロロエタン		168	0.99	2.39	2.19	1000	7.6

Table2 トレーニングセット(Dmax が 8 Å 未満の化審法既存化学物質(23 物質)) [続き]

No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
71	306-83-2	2, 2-ジクロロ-1, 1, 1-トリフルオロエ タン(フロン123)		153	0.99	2.18	2.17	2100	6.9
72	75-35-4	1, 1-ジクロロ エチレン		97	0.63	2.15	2.12	210	6.4
73	78-87-5	1, 2-ジクロロ プロパン		113	0.45	2.09	2.25	1000	7.6
74	79-00-5	1, 1, 2-トリクロロ エタン		133	0.59	1.99	2.01	3500	7.6
75	67-66-3	トリクロロメタン		119	0.96	1.97	1.52	5000	6.2
76	74-97-5	ブロモクロロメタン		129	0.40	1.41	1.43	14000	6.5
77	75-09-2	ジクロロメタン		85	1.46	1.25	1.34	7900	6.2

Table3 トレーニングセット(logKow^{*3} ≥ 6 または Dmax^{*4} ≥ 11 Å の化審法既存化学物質(10 物質))

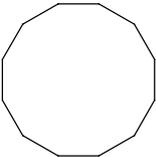
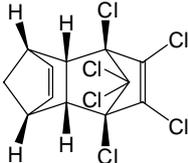
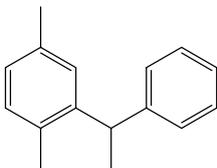
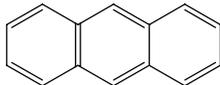
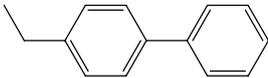
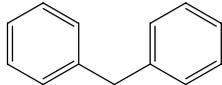
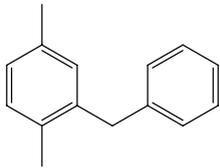
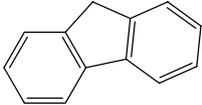
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
78	294-62-2	シクロドデカン		168.3	3.75	-	6.12	10	9.2
79	309-00-2	アルドリン		364.9	3.80	6.50	6.75	0.18	10.0
80	6165-51-1	1,4-ジメチル-2-(1-フェニルエチル)ベンゼン		210.3	2.81	5.39	5.24	96	11.4
81	120-12-7	アントラセン		178.2	3.26	4.69	4.35	1.24	11.7
82	5707-44-8	4-エチルビフェニル		182.3	2.94	5.08	4.8	1.6	13.6
83	101-81-5	ジフェニルメタン		168.2	2.81	4.14	4.02	1.41	11.2
84	13540-50-6	フェニル-キシリルメタン		196.3	3.07	-	5.11	0.684	11.5
85	105-05-5	p-ジエチルベンゼン		134.2	2.69	4.53	4.07	24.8	11.4

Table3 トレーニングセット(logKow^{*3} ≥ 6 または Dmax^{*4} ≥ 11 Å の化審法既存化学物質(10 物質))
 [続き]

No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
86	86-73-7	フルオレン		166.2	2.72	4.43	4.02	1.69	11.2

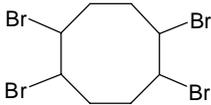
87	3194-57-8	1, 2, 5, 6-テトラ ブロモシクロオクタン		427.8	3.43	-	5.24	0.347	11.2

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質))

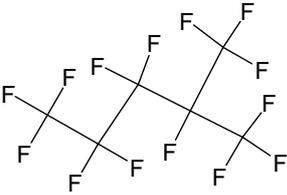
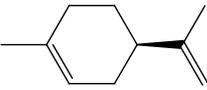
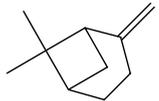
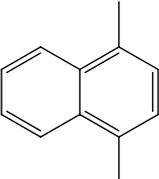
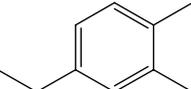
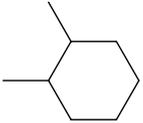
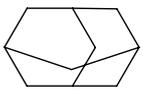
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [A]
88	355-04-4	1,1,1,2,2,3,3,4,5,5,5-undecafluoro-4-(trifluoromethyl)pentane		338	3.99	5.31	9.94
89	5989-27-5	Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (R)-		136	3.49	4.83	10.49
90	127-91-3	Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-		136	3.00	4.35	8.75
91	571-58-4	1,4-dimethylnaphthalene		156	2.91	4.26	9.40
92	934-80-5	Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-		134	2.77	4.13	10.33
93	583-57-3	1,2-dimethylcyclohexane		112	2.65	4.01	8.20
94	281-23-2	Tricyclo[3.3.1.1.3,7]decane		136	2.58	3.94	7.17

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質)) [続き]

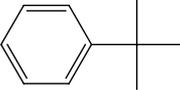
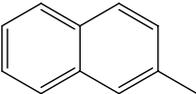
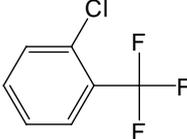
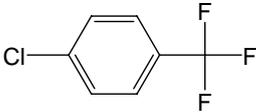
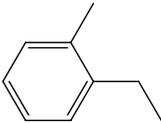
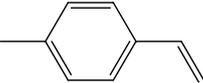
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [A]
95	98-06-6	Benzene, (1,1-dimethylethyl)-		134	2.54	3.90	9.42
96	91-57-6	Naphthalene, 2-methyl-		142	2.35	3.72	10.36
97	88-16-4	Benzene, 1-chloro-2-(trifluoromethyl)-		181	2.23	3.60	8.54
98	98-56-6	p-trifluoro chlorobenzene		181	2.23	3.60	9.6
99	611-14-3	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-		120	2.21	3.58	9.43
100	622-97-9	Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-		118	2.06	3.44	10.38
101	106-38-7	Benzene, 1-bromo-4-methyl-		171	2.05	3.43	9.52

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質)) [続き]

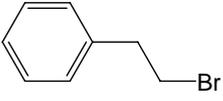
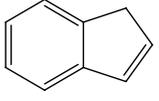
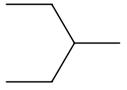
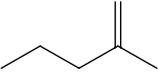
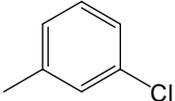
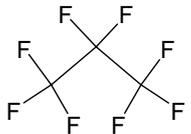
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [A]
102	103-63-9	Benzene, (2-bromoethyl)-		185	1.99	3.37	10.87
103	95-13-6	1H-Indene		116	1.87	3.25	8.95
104	96-14-0	Pentane, 3-methyl-		86	1.83	3.21	8.90
105	763-29-1	1-Pentene, 2-methyl-		84	1.83	3.21	8.52
106	563-79-1	2-Butene, 2,3-dimethyl-		84	1.81	3.19	7.62
107	108-41-8	Benzene, 1-chloro-3-methyl-		127	1.80	3.18	8.63
108	76-19-7	Propane, octafluoro-		188	1.73	3.12	7.50

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質)) [続き]

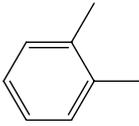
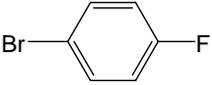
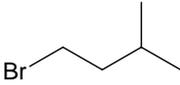
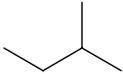
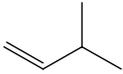
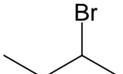
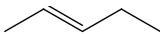
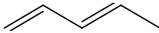
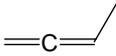
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [Å]
109	95-47-6	Benzene, 1,2-dimethyl-		106	1.70	3.09	8.06
110	460-00-4	p-bromofluorobenzene		174	1.69	3.08	9.0
111	107-82-4	Butane, 1-bromo-3-methyl-		151	1.68	3.07	9.20
112	78-78-4	Butane, 2-methyl-		72	1.32	2.72	7.73
113	563-45-1	1-Butene, 3-methyl-		70	1.19	2.59	7.60
114	78-76-2	Butane, 2-bromo-		137	1.18	2.58	7.73
115	109-68-2	2-Pentene		70	1.18	2.58	8.72

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質)) [続き]

No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [Å]
116	2004-70-8	1,3-Pentadiene, (3E)-		68	1.04	2.45	8.71

117	590-19-2	1,2-Butadiene		54	0.64	2.06	7.35

2. 様々な理由で解析に使用しなかった物質:

当カテゴリー定義に該当するが、試験条件等の理由で解析に使用しなかった化審法既存化学物質を示す(Table5)。

Table5 解析に使用しなかった化審法既存化学物質(18 物質)とその除外理由

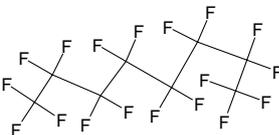
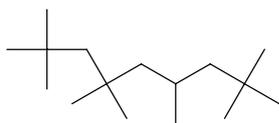
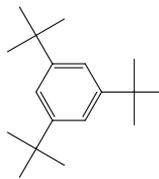
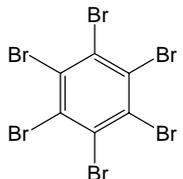
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow* ¹ (計算値) [-]	除外理由
118	544-76-3	n-ヘキサデカン	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃	226	1.36	8.20	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
119	307-34-6	ペルフルオロオクタン		438	3.93	7.95	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
120	4390-04-9	2, 2, 4, 4, 6, 8, 8-ヘプタメチルノナン		226	2.08	7.79	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
121	1460-02-2	1, 3, 5-トリ-tert-ブチルベンゼン		246	4.42	7.72	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
122	629-62-9	n-ペンタデカン	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃	212	1.49	7.71	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
123	-	塩素化パラフィン	CH ₃ (CH ₂) ₁₂ CH ₂ Cl	233	2.56	7.47	・対水溶解度の値が明確に測定されていない ・混合物で測定されている
124	87-82-1	ヘキサブロモベンゼン		552	0.75	7.33	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある

Table5 解析に使用しなかった化審法既存化学物質(18 物質)とその除外理由[続き]

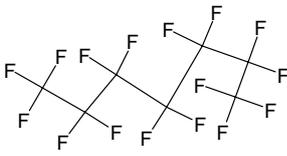
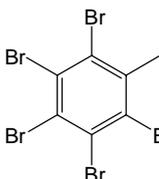
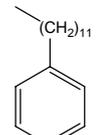
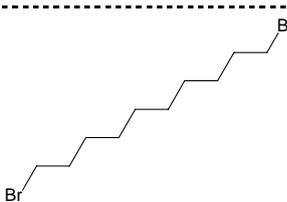
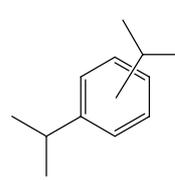
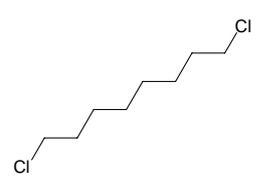
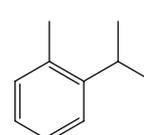
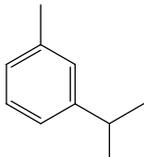
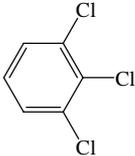
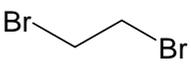
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow*1 (計算値) [-]	除外理由
125	335-57-9	ペルフルオロヘプタン		388	3.74	6.99	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
126	87-83-2	ペンタブロモトルエン		487	1.47	6.99	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
127	123-01-3	アルキル(C=6~18)ベンゼン(分枝型)		204	2.10	6.40	・混合物で測定されている
128	4101-68-2	1, 10-ジブロムデカ		300	1.59	5.94	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
129	25321-09-9	ジイソプロピルベンゼン		162	3.15	4.90	・混合物で測定されている
130	2162-99-4	1, 8-ジクロロオクタ		183	2.45	4.78	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
131	527-84-4	o-シメン		134	-	4.00	・m-シメン【難分解・低濃縮性】の結果から類推されているため、濃縮度試験が行われていない
132	535-77-3	m-シメン		134	2.69	4.00	・対水溶解度の値が明確に測定されていない

Table5 解析に使用しなかった化審法既存化学物質(18 物質)とその除外理由[続き]

No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow*1 (計算値) [-]	除外理由
133	87-61-6	1, 2, 3-トリクロロベンゼン		181	2.61	3.93	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
134	367-11-3	1, 2-ジフルオロベンゼン		114	-	2.39	・分配係数の値から類推されているため、濃縮度試験が行われていない
135	106-93-4	1, 2-ジブロムエタン		188	0.35	2.01	・対水溶解度の値が明確に測定されていない

3. 補足データ:

logKow と logBCF の相関が弱くなる傾向にある logKow \geq 6 の物質(Table3)、分子サイズが大きく、生体膜透過における拡散速度が遅くなる傾向にある物質(Table3)の logKow vs. logBCF プロットを Fig.1,2 に示す。

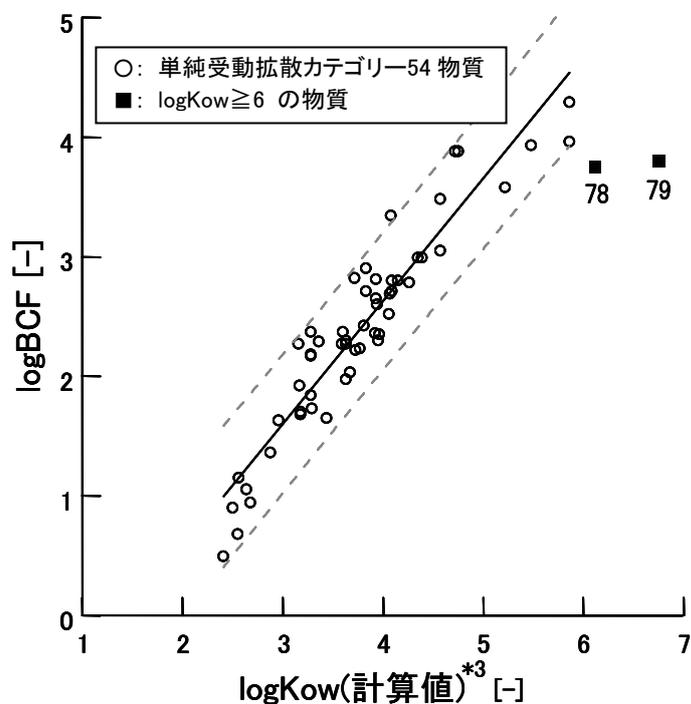


Fig.1 単純受動拡散カテゴリ該当物質と脂肪族、芳香族炭化水素およびハロゲン化物かつ logKow \geq 6 の物質の logKow vs. logBCF プロット

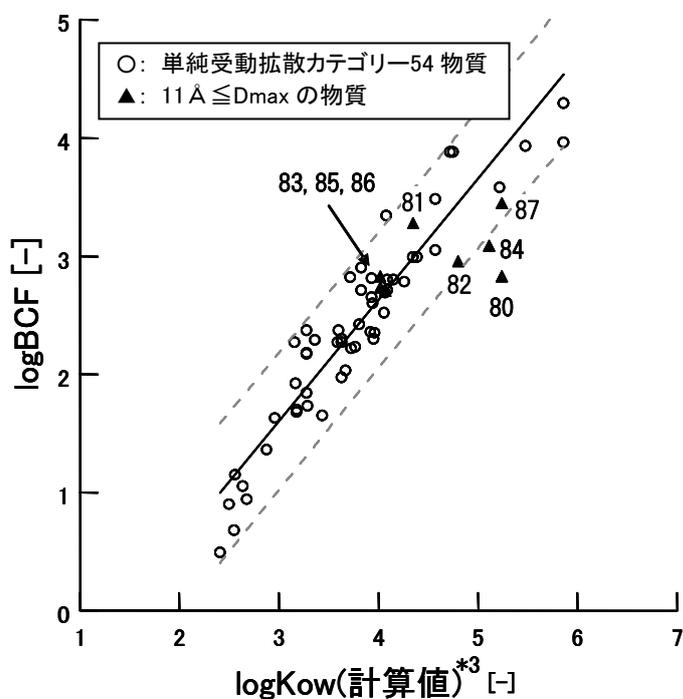


Fig.2 単純受動拡散カテゴリ該当物質と脂肪族、芳香族炭化水素およびハロゲン化物かつ Dmax \geq 11 Å の物質の logKow vs. logBCF プロット

用語集：

【BCFWIN ver.2.15】

アメリカの EPA で使用されているモデル。予測対象物質をイオン性と非イオン性に分類し、logKow-logBCFの相関式から BCF を予測する。logKow の算出には KOWWIN を使用する。

【CERI モデル ver.2.18】

(財)化学物評価研究機構によって開発されたモデル。予測対象物質を分子構造によって予測困難物質、定性予測を行う物質、logKow-logBCF の相関式を用いて予測する物質に分類し、BCF の予測を行う。logKow の算出には ClogP を使用する。

【Baseline Model ver.5.100】

ブルガリアにある Prof. Assen Zlatarov 大学の Dimitrov らによって提唱されたモデル。このモデルでは、logKow で表される受動拡散の式から logBCFmax を算出し、この値から物質の代謝性、分子サイズ、解離性などで表される Mitigation Factor を引くことによって BCF の予測を行う。物質の代謝性は、論文等で公表されている Rat の代謝情報をデータベース化したシミュレータより求める。分子サイズは、自動生成されるいくつかの分子配座を初期構造とし、半経験的量子化学計算を用いて計算される最安定構造から算出する。量子化学計算には mopac、logKow の算出には KOWWIN を使用する。

カテゴリーアプローチによる評価報告書の例(1)

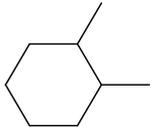
資料3-別添2

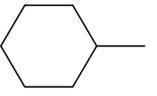
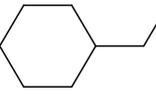
区分		対象物質	<p>該当カテゴリー: 単純受動拡散カテゴリー</p> <p>相関式による予測: $\log BCF = 2.00 \pm 0.53$ $\cdot \log BCF = 1.05 \log Kow - 1.71 = 1.05 \times 3.53 - 1.71 = 2.00$ $\cdot (95\% \text{信頼区間}) = t \times \sqrt{Ve} \times \sqrt{1 + 1/n + (x - x_{ave})^2 / S_{xx}} = 0.53$</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 10px auto;"> <p>n(トレーニングセットのデータ数): 48 Ve(相関式の誤差分散): 0.067 x(対象物質のlogPow): 3.53 xave(トレーニングセットのlogPowの平均値): 3.83 Sxx(logPowの標準偏差の平方和): 26.62 t分布表(両側, $\alpha=0.05$, 自由度46)より $t=2.013$</p> </div> <p>Read-acrossによる予測: $\log BCF = 2.16 \pm 0.24$ \cdot類似物質の選択条件 基本骨格: ベンゼン2置換体 置換基: ハロゲンまたはトリフルオロメチル基 $\log Pow: 3.53$ (対象物質のlogPow) ± 0.5 $\cdot \log BCF = (\text{類似物質1-5のlogBCFの平均値}) = 2.16$ $\cdot (95\% \text{信頼区間}) = S.E. \times t = 0.24$</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 10px auto;"> <p>S.E.(類似物質1-5のlogBCFの標準誤差) = 0.09 t分布表(両側, $\alpha=0.05$, 自由度4)より $t=2.776$</p> </div>	<p>総合評価: $\log BCF = 2.16 \pm 0.24$ (Read-across) (相関式の95%信頼区間(0.53)より、Read-acrossの95%信頼区間(0.24)の方が幅が狭く、信頼性が高いため、Read-acrossによる予測結果を採用する。)</p>
化学物質名		クロロベンゾトリフルオライド		
CAS		88-16-4		
構造式				
物理化学的性状	分子量	180.5		
	沸点[°C]	-		
	融点[°C]	-		
	対水溶解度 [mg/l]	-		
	Dmax*1 [Å]	8.5		
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	3.53(実測値) 3.60(計算値*2)		

区分	類似物質1	類似物質2	類似物質3	類似物質4	類似物質5	
化学物質名	o-ジクロロベンゼン	m-ジクロロベンゼン	p-ジクロロベンゼン	p-ジブロモベンゼン	メタキシレンヘキサフルオライド	
CAS	95-50-1	541-73-1	106-46-7	106-37-6	402-31-3	
構造式						
物理化学的性状	分子量	147.0	147.0	147.0	235.9	214.1
	沸点[°C]	180.0	173.0	174.0	220.0	116.0
	融点[°C]	-16.7	-24.8	52.1	87.3	3.8
	対水溶解度 [mg/l]	100	75	49	12	28
	Dmax*1 [Å]	8.3	8.7	9.5	10.1	9.8
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	3.66(実測値) 3.28(計算値*2)	3.63(実測値) 3.28(計算値*2)	3.41(実測値) 3.28(計算値*2)	3.85(実測値) 3.77(計算値*2)	3.87(実測値) 3.92(計算値*2)
濃縮度試験結果(logBCF*3)	2.18	2.17	1.84	2.23	2.36	

*1 化学物質の安定構造における最大直径
 *2 KOWWIN ver.1.67により算出
 *3 logBCFの後半6点の平均値

カテゴリーアプローチによる評価報告書の例(2)

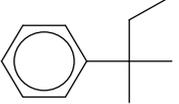
区分	対象物質	<p align="center">該当カテゴリー: 単純受動拡散カテゴリー</p> <p>相関式による予測: $\log BCF = 2.65 \pm 0.57$ $\cdot \log BCF = 1.03 \log Pow(\text{実測値}) - 1.48 = 1.03 \times 4.01 - 1.48 = 2.65$ $\cdot (95\% \text{信頼区間}) = t \times \sqrt{Ve} \times \sqrt{1 + 1/n + (x - x_{ave})^2 / S_{xx}} = 0.57$</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 10px auto;"> <p>n(トレーニングセットのデータ数): 54 Ve(相関式の誤差分散): 0.080 x(対象物質のlogPow): 4.01 x_{ave}(トレーニングセットのlogPowの平均値): 3.77 S_{xx}(logPowの標準偏差の平方和): 32.02 t分布表(両側, $\alpha=0.05$, 自由度52)より $t=2.007$</p> </div> <p>Read-acrossによる予測: $\log BCF = 2.81 \pm 6.80$ \cdot類似物質の選択条件 基本骨格: メチルシクロアルカン 置換基: ハロゲンまたは炭化水素 logPow: 4.01(対象物質のlogPow) ± 0.5 $\cdot \log BCF = (\text{類似物質1-2のlogBCFの平均値}) = 2.81$ $\cdot (95\% \text{信頼区間}) = S.E. \times t = 6.80$</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 10px auto;"> <p>S.E.(類似物質1-2のlogBCFの標準誤差) = 0.535 t分布表(両側, $\alpha=0.05$, 自由度1)より $t=12.706$</p> </div>	総合評価: $\log BCF = 2.65 \pm 0.37$ (相関式) (Read-acrossの95%信頼区間(6.80)より、相関式の95%信頼区間(0.57)の方が幅が狭く、信頼性が高いため、相関式による予測結果を採用する。)
化学物質名	ジメチルシクロヘキサン		
CAS	583-57-3		
構造式			
物理化学的性状	分子量	112.2	
	沸点[°C]	129.8	
	融点[°C]	-49.8	
	対水溶解度 [mg/l]	6.0	
	Dmax*1 [Å]	8.2	
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	4.01(計算値*2)	

区分	類似物質1	類似物質2			
化学物質名	メチルシクロヘキサン	エチルシクロヘキサン			
CAS	108-87-2	1678-91-7			
CAS					
物理化学的性状	分子量	98.2	112.2		
	沸点[°C]	100.9	131.9		
	融点[°C]	-	-		
	対水溶解度 [mg/l]	-	-		
	Dmax*1 [Å]	8.1	9.6		
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	3.87(実測値) 3.59(計算値*2)	4.79(実測値) 4.08(計算値*2)		
濃縮度試験結果(logBCF*3)	2.27	3.34			

*1 化学物質の安定構造における最大直径
 *2 KOWWIN ver.1.67により算出
 *3 logBCFの後半6点の平均値

カテゴリーアプローチによる評価報告書の例(3)

区分	対象物質	<p align="center">該当カテゴリー：単純受動拡散カテゴリー</p> <p>相関式による予測： $\log BCF = 2.84 \pm 0.53$ $\cdot \log BCF = 1.05 \log Pow(\text{実測値}) - 1.71 = 1.05 \times 3.53 - 1.71 = 2.00$ $\cdot (95\% \text{信頼区間}) = t \times \sqrt{Ve} \times \sqrt{1 + 1/n + (x - x_{ave})^2 / S_{xx}} = 0.53$</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 10px auto;"> <p>n(トレーニングセットのデータ数): 48 Ve(相関式の誤差分散): 0.067 x(対象物質のlogPow): 4.11 x_{ave}(トレーニングセットのlogPowの平均値): 3.83 S_{xx}(logPowの標準偏差の平方和): 26.62 t分布表(両側、$\alpha = 0.05$、自由度46)より $t = 2.013$</p> </div> <p>Read-acrossによる予測： 予測不能(類次物質が1物質のため) \cdot 類似物質の選択条件 基本骨格： tert-ブチルベンゼン 置換基： ハロゲンまたは炭化水素 logPow： 4.11(対象物質のlogPow) ± 0.5</p>	<p>総合評価： $\log BCF = 2.84 \pm 0.53$ (相関式) (Read-acrossは予測不能のため、相関式による予測結果を採用する。)</p>
化学物質名	tert-ブチルベンゼン		
CAS	98-06-6		
構造式			
物理化学的性状	分子量	134.2	
	沸点[°C]	168.5	
	融点[°C]	-58.1	
	対水溶解度 [mg/l]	29.5	
	Dmax*1 [Å]	9.4	
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	4.11(実測値) 3.90(計算値)	

区分	類似物質1				
化学物質名	tert-アミルベンゼン [tert-ペンチルベンゼン]				
CAS	2049-95-8				
構造式					
物理化学的性状	分子量	148.2			
	沸点[°C]	192.4			
	融点[°C]	-			
	対水溶解度 [mg/l]	-			
	Dmax*1 [Å]	9.4			
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	- 4.39(計算値*2)			
濃縮度試験結果(logBCF*3)	2.99				

*1 化学物質の安定構造における最大直径
 *2 KOWWIN ver.1.67により算出
 *3 logBCFの後半6点の平均値