

評価物質のQSAR予測結果

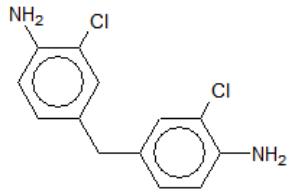
使用可のQSAR予測値一覧

No.	化学物質		種類	毒性値(mg/L)					
	物質名	優先評価化学物質番号		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	ジエチル=フタラート	253	試験結果	45	9	52	3.8	12	データなし
			KATE	52 [6.2-440]	13 [1.2-140]	33 [4.6-250]	3.7 [0.23-61]	15	
			ECOSAR	9.30	2.94	24.19	13.74	12.47	0.819
			TIMES	27 [3.14-232]				8.9146 [5.032-15.792]	
2	4, 4'-ジアミノ-3, 3'-ジクロロジフェニルメタン(別名4, 4'-メチレンビス(2-クロロアニリン))	255	試験結果	0.85	0.54	0.92	0.0095	0.61	データなし
			KATE		0.57 [0.076-4.3]			4.4	
			ECOSAR	>2.35	>0.35	>1.16	>1.64E-02	3.16	>1.74E-02
			TIMES						
3	2-イソプロキシエタノール	150	試験結果	1920	320	2100	データなし	データなし	データなし
			KATE		60 [5.7-640]		43 [0.70-2600]	1400	
			ECOSAR	453.43	87.11	1082.07	71.64	2190.19	181.68
			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	優先253 ジエチル=フタラート 備考:CAS RN 84-66-2 MW 222.23 水溶解度(mg/L) ※1 287.2 Log P(Kow Win) ※1 2.65 Log BCFmaxtox ※3 2.01 LUMO(eV) ※4 -0.73  <chem>O=C(OCC)c1ccccc1C(OCC)=O</chem>	魚類	急性	12	esters R2:0.79, n:26 8.9146 [5.032-15.792]	Esters R2:0.79 n:102 12.47	CNO_X ester unreactive 15 [1.9-120]
			慢性	データなし		Esters R2:0.79 n:102 0.819	No applicable result
		甲殻類	急性	52	Reactive unspecified R2: n: <=26.7449 [14.848-48.174] (minimum toxicity)	Esters R2:0.81 n:47 24.19	● CNO_X ester unreactive 33 [4.6-250]
			慢性	3.8		Esters R2:0.81 n:47 13.74	CNO_X ester unreactive Daphnid 35 [4.0-300]
		藻類	急性	45	Baseline narcotics R2:0.78, n:100 27 [3.14-232]	Esters R2:0.79 n:28 9.30	CNO_X ester unreactive Alga 52 [6.2-440]
			慢性	9		Esters R2:0.79 n:28 2.94	CNO_X ester unreactive Alga 13 [1.2-140]

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
2	優先255 4, 4'-ジアミノ-3, 3'-ジクロロジフェニルメタン (別名4, 4'-メチレンビス(2-クロロアニリン)) 備考:CAS RN 101-14-4を予測 MW 267.14 水溶解度(mg/L) ※1 8.684 Log P(Kow Win) ※1 3.47 Log BCFmaxtox ※3 2.6 LUMO(eV) ※4 0.24  <chem>Nc1c(cc(cc1)Cc2cc(Cl)c(cc2)N)Cl</chem>	魚類	急性	0.61	使用不可 phenols and anilines R2:0.86, n:93 5.2800* [4.100-6.799] ※D(ドメイン外)	使用可 Anilines (Unhindered) R2:0.56 n:77 3.16	使用可 amine primary unreactive NH2 >1 4.4 [0.16-120]
			慢性	データなし		使用可 Anilines (Unhindered) R2:0.56 n:77 >1.74E-02	使用不可 No applicable result
		甲殻類	急性	0.92	使用不可 phenols and anilines R2:0.51 n:49 5.8566* [3.570-9.608] ※D(ドメイン外)	使用可 Anilines (Unhindered) R2:0.15 n:57 >1.16	使用不可 No applicable result
			慢性	0.0095		使用可 Anilines (Unhindered) R2:0.15 n:57 >1.64E-02	使用不可 No applicable result
		藻類	急性	0.85	使用不可 Anilines R2:0.32, n:20 7.69* [0.59-100] ※D(ドメイン外)	使用可 Anilines (Unhindered) R2:0.2 n:35 >2.35	使用不可 No applicable result
			慢性	0.54		使用可 Anilines (Unhindered) R2:0.2 n:35 >0.35	使用可 amine primary unreactive NH2 >1, Nv3 <3 0.57 [0.076-4.3]

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	優先150 2-イソプロキシエタノール 備考:CAS RN 4439-24-1 MW 118.17 水溶解度(mg/L) ※1 7.55E+04 Log P(Kow Win) ※1 0.49 Log BCFmaxtox ※3 1.06 LUMO(eV) ※4 2.74  CC(COCCO)C	魚類	急性	データなし	使用不可 basesurface narcotics R2: n: 3153.4092 [2421.680-4106.236] ※D(ドメイン外)	使用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 2190.19	使用可 primary alcohol 2700 [270-27000]
			慢性	データなし		使用可 Neutral Organics R2:0.88 n:296 181.68	使用不可 CO_X ether unreactive 2000 [150-25000]
							● CO_X alcohol unreactive w/ EO 1400 [190-10000]
							使用不可 No applicable result
		甲殻類	急性	2100	使用不可 basesurface narcotics R2: n: 3737.9702 [2135.790-6542.039] ※D(ドメイン外)	使用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 1082.07	使用不可 CO_X ether unreactive 1100 [51-23000] ※P+(LogP適用領域外)
			慢性	データなし		使用可 Neutral Organics R2:0.77 n:98 71.64	使用可 CO_X ether unreactive 43 [0.70-2600]
		藻類	急性	1920	使用不可 Baseline narcotics R2:0.78, n:100 782 [85.1-7180] ※D(ドメイン外)	使用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 453.43	使用不可 primary alcohol 11000 [73-1.7E+06] ※P+(LogP適用領域外) CO_X ether unreactive excl HRAC Alga 1300 [160-11000] ※P+(LogP適用領域外)
			慢性	320		使用可 Neutral Organics R2:0.68 n:41 87.11	使用可 CO_X ether unreactive excl HRAC Alga 60 [5.7-640]

【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でない、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Suupport 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Suupport 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。