

平成25年度エームス試験結果と構造活性相関結果の比較

※第2回遺伝毒性評価ワーキンググループにおいて、過去にエームス試験が実施されていない17物質について、エームス試験候補とするともに、構造活性相関の候補にすべきとの提案があった。

※この17物質のうち、試薬の入手が可能で、エームス試験を実施し、かつ、構造活性相関を実施した6物質について両者の結果を示す。

試験番号	作業用 番号	CAS番号	物質名 (和名)	試験機関による結果 の判定		構造活性相関の推計結果			
				結果	最大 比活性値 (Rev/mg)	Derek Nexus	ADME WORKS	CaseUltra	総合 判定
T-1440	198	111-65-9	n-オクタン	陰性		-	-	-	-
T-1441	207	112-02-7	ヘキサデシルトリメチルアンモニウムクロリド	陰性		-	-	-	-
T-1442	221	112-42-5	ウンデカン-1-オール	陰性		-	-	-	-
T-1443	253	121-57-3	アニリンスルホン酸	陰性		-	-	-	-
T-1454	441	3982-91-0	塩化チオホスホリル	陰性		-	-	-	-
T-1455	456	5888-33-5	アクリル酸=2-ボルニル	陰性		-	-	-	-