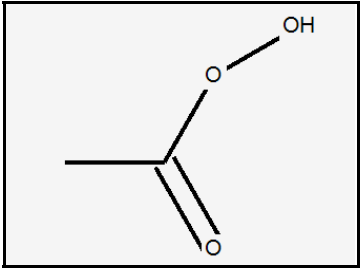
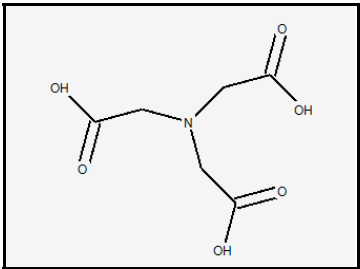
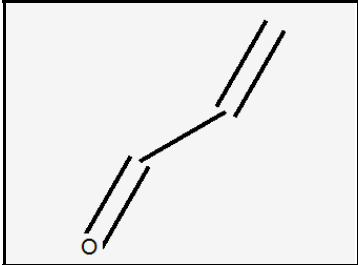
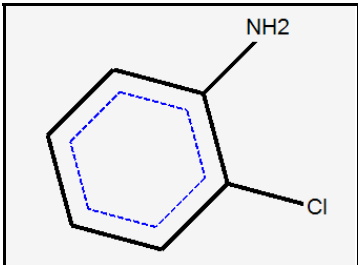


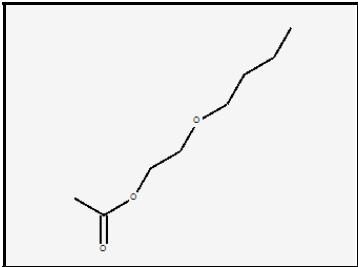
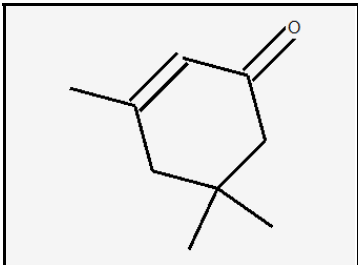
QSAR予測結果 片側優先 1. 今回新たに有害性クラスの付与を行う物質(候補)

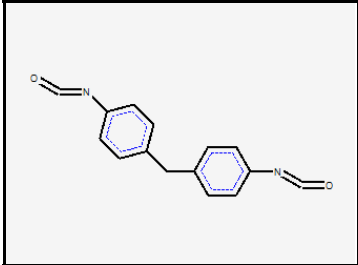
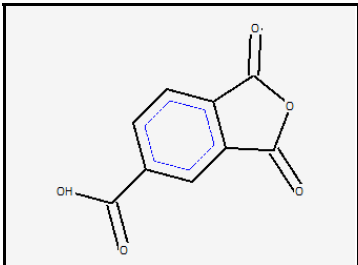
資料7-4参考

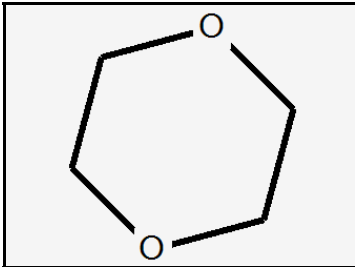
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
1	優先92 過酢酸 CAS番号 79-21-0 備考: 	魚類	使用可 0.078 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 15900 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 36000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 esters aliphatic 1600 mg/L ※P, ※F:判定不能 (logP及び部分構造 適用範囲外)
			甲殻類	使用可 0.48 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 40900 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OPeroxy Acids 94.7 mg/L Baseline Toxicity 15400 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)
分子量 76.05 logP(KowWin) -1.074 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -8.01E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 5.76E-1~7.85E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
2	旧指定または旧2監802, 優先37 ニトリロ三酢酸 CAS番号 139-13-9 備考: アミン類 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 6110000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OAliphatic Amines-acid 2410000 mg/L Baseline Toxicity 2.59e+7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 secondary or tertiary amines 390000 mg/L ※P, ※F:判定不能 (logP及び部分構造 適用範囲外)
			甲殻類	使用可 106.815 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3.55e+7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OAliphatic Amines-acid 146000 mg/L Baseline Toxicity 8590000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)
分子量 191.14 logP(KowWin) -3.809 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -2.84E+0 ※3 [予測値] 738900 ※1 LUMO(eV) 3.46E-1~6.52E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
6	旧指定または旧2監789, CAS番号 107-02-8 旧3監171,優先113 アクロレイン 備考: 	魚類	使用可 0.014 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 813 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OVinyl/Allyl Aldehydes 0.123 mg/L Baseline Toxicity 1950 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 conjugated systems1 3.30 mg/L
		甲殻類	使用可 0.057 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1630 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OVinyl/Allyl Aldehydes 969 mg/L Baseline Toxicity 936 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 conjugated systems1 8.10 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
7	旧指定または旧2監403, CAS番号 95-51-2 旧3監16,優先58 2-クロロアニリン 備考: アミン類 	魚類	使用可 7.34 mg/L	使用不可 phenols and anilines 48.1 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 OAnilines (Unhindered) 28.5 mg/L Baseline Toxicity 187 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols3 7.60 mg/L
		甲殻類	使用可 1.99 mg/L	使用不可 phenols and anilines 21.1 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 OAnilines (Unhindered) 0.918 mg/L Baseline Toxicity 103 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols3 1.10 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
8	旧指定または旧2監1071, CAS番号 120-80-9 優先65 ピロカテコール(別名カテコール)	魚類	使用可 8.9 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 394 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OPhenols, Poly 22.2 mg/L ----- Baseline Toxicity 669 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols3 8.70 mg/L
		甲殻類	使用可 2.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 583 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OPhenols, Poly 256 mg/L ----- Baseline Toxicity 347 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols3 0.980 mg/L
9	旧指定または旧2監409, CAS番号 98-95-3 優先59 ニトロベンゼン	魚類	使用可 24 mg/L	使用可 basesurface narcotics 57.8 mg/L	使用可 Neutral Organics 150 mg/L	使用可 nitrobenzenes 36.0 mg/L
		甲殻類	使用可 33 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 84.8 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 83.5 mg/L	使用可 nitrobenzenes 18.0 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
10	優先118 CAS番号 112-07-2 2-ブトキシエチル=アセタート 備考: 	魚類	使用可 22 mg/L	使用可 esters 72.9 mg/L	使用可 OEsters 38.1 mg/L Baseline Toxicity 319 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 55.0 mg/L
		甲殻類	使用可 37 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 316 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OEsters 82.9 mg/L Baseline Toxicity 174 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 70.0 mg/L
	分子量 160.21 logP(KowWin) 1.572 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.17E+0 ※3 [予測値] 3103 ※1 LUMO(eV) 9.71E-1~1.3E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
11	優先132 CAS番号 78-59-1 3, 5, 5-トリメチルシクロヘキサ-2-エン-1-オン 備考: 	魚類	使用可 145 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 22.2 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OVinyl/Allyl Ketones 47.5 mg/L Baseline Toxicity 31.6 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 ketones 33.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外) Neutral Organics 40.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 224 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 21.9 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OVinyl/Allyl Ketones 26.1 mg/L Baseline Toxicity 19.0 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 Neutral Organics 13.0 mg/L
	分子量 138.21 logP(KowWin) 2.618 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.95E+0 ※3 [予測値] 3010 ※1 LUMO(eV) -2.2E-2~-2.18E-2 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
13	<p>旧指定または旧2監998, CAS番号 101-68-8 優先74 メチレンビス(4,1-フェニレン)=ジイソシアネート(4,4'-M.D.I.)</p> <p>備考:</p>  <p>分子量 250.26 logP(KowWin) 5.215 ※2 対水溶解(mg/L) 1.51 ※1 logBCFmaxtox 3.87E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -4.48E-1~-4.13E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6</p>	魚類	使用可 > 497 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.273 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 0.266 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 0.270 mg/L 判定不能 (信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 64.46 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.139 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 0.203 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 0.290 mg/L 判定不能 (信頼性が低いクラス)
14	<p>旧指定または旧2監1082, CAS番号 552-30-7 優先69 1,2,4-ベンゼントリカルボン酸1,2-無水物</p> <p>備考:</p>  <p>分子量 192.13 logP(KowWin) 1.95 ※2 対水溶解(mg/L) 1376 ※1 logBCFmaxtox 1.46E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -2.E+0~-1.99E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6</p>	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 47.0 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1750 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 esters aromatic 28.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 792 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 76.7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 989 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 esters aromatic 64.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
15	旧指定または旧2監8,優先80 1,4-ジオキサン CAS番号 123-91-1 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 10600 mg/L	使用可 Neutral Organics 8770 mg/L	使用可 Oethers aliphatic 9300 mg/L Neutral Organics 7300 mg/L
		甲殻類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 15900 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4020 mg/L	使用不可 Neutral Organics 710 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 88.11 対水溶解(mg/L) [予測値] 466000 ※1 logP(KowWin) -0.32 ※2 logBCFmaxtox -2.39E-1 ※3 LUMO(eV) 2.62E+0~2.82E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

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(○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

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判定不能(信頼性の低いクラス)

- ・KATE:Unclassified
- 判定不能(minimum toxicity)
- ・TIMES:Reactive Unspecified
- ・ECOSAR:Baseline toxicity, Baseline toxicity(Acid)

minimum toxicityの予測値は、単純な非極性麻酔作用モデル(TIMES)ではbasesurface narcotics、ECOSARではNeutral Organics、NeutralOrganics(acid)のQSAR式により算出したものである。この値よりも有意に高い毒性があるかどうかは、類似構造を持つ化学物質による試験データがないため不明である。

(※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> logPが回帰式の有効範囲より大きい物質は"no effects at saturation"であり、溶解度以上の値で毒性が示されるため、判定は「有害性クラス外相当」となる(ECOSAR)

※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>