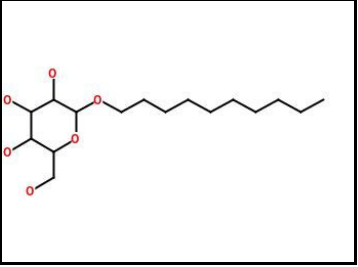
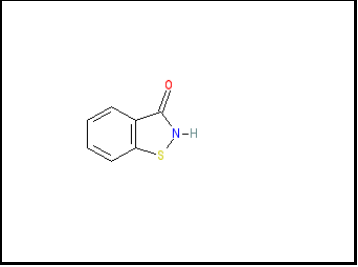
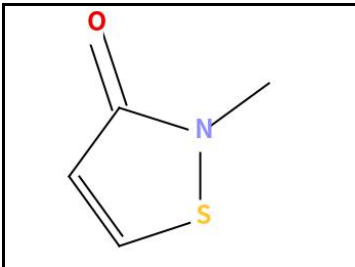
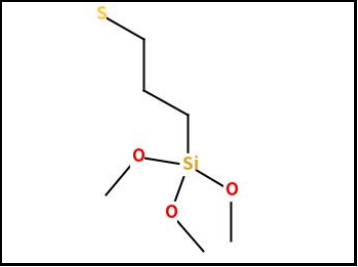


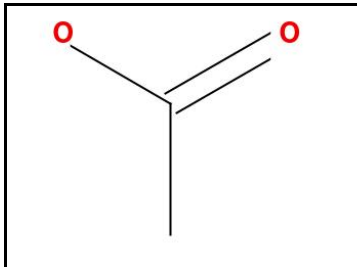
令和7年度QSAR予測(今回新たに有害性クラスの付与を行う物質について)

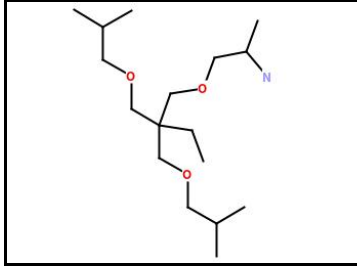
	化学物質	対象	毒性値		
			試験結果	KATE2020 ※7	ECOSAR ※8
1	単位検討物質 CAS番号 68515-73-1 110615-47-9 132778-08-6 アルキル(C=8～16、直鎖型)=D-グルコピラノシド又は(D-グルコピラナン(糖間の結合がグリコシド結合であるものに限る。))のアルキル(C=8～16、直鎖型)グリコシド)  CCCCCCCCCOC1O[C@](CO)[C@@](O)[C@](O)[C@]1O 分子量 316.39 水溶解度(実測) mg/L 試験用水への溶解度 藻類 mg/L 甲殻類 mg/L 魚類 mg/L 水溶解度(予測) 215.1 mg/L logP(KowWin) 1.92※2 logBCFmax ※3 EnergyLUMO ※4 備考:	藻類	EC50 12.5 mg/L	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし) ●CO_X ether unreactive excl. HRAC Ea Alga [R2:0.93、Q2:0.85、n:9] 220 mg/L CO_X alcohol unreactive w/o halogen, acid, EO [R2:0.95、Q2:0.9、n:6] 300 mg/L narcotic group Alga Acute [R2:0.76、Q2:0.74、n:52] 360 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 予測不能
		甲殻類	EC50 7 mg/L	有害性クラス 4 相当 (水溶解度情報なし) CO_X ether unreactive [R2:0.83、Q2:0.74、n:15] 130 mg/L CO_X alcohol unreactive w/o EO Daphnid [R2:0.78、Q2:0.72、n:14] 190 mg/L ● narcotic group Daphnid Acute [R2:0.71、Q2:0.7、n:83] 70.0 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 予測不能
		魚類	LC50 2.95 mg/L	有害性クラス 4 相当 (水溶解度情報なし) ●CO_X ether unreactive [R2:0.87、Q2:0.86、n:44] 310 mg/L CO_X alcohol unreactive w/o EO Fish [R2:0.89、Q2:0.88、n:46] 620 mg/L narcotic group Fish Acute [R2:0.87、Q2:0.87、n:154] 380 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 予測不能
2	CAS番号 2634-33-5 1, 2-ベンゾチアゾリン-3-オン  O=C1NSC2=CC=CC=C21 分子量 151.19 水溶解度(実測) mg/L 試験用水への溶解度 藻類 mg/L 甲殻類 mg/L 魚類 mg/L 水溶解度(予測) 143e+004 mg/L logP(KowWin) 0.64※2 logBCFmax ※3 EnergyLUMO ※4 備考:	藻類	EC50 0.110 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*7)を満たすQSARクラスは存在せず。	判定不能 (水溶解度情報なし) 予測不能
		甲殻類	EC50 1.1 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) CNOS_X N-hetero unreactive w/o amine, aldoxime, carbamate [R2:0.78、Q2:0.63、n:6] 500 mg/L ※P,※S:(logP適用範囲外,構造適用範囲外)	判定不能 (水溶解度情報なし) 予測不能
		魚類	LC50 1.8 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) CNOS_X N-hetero unreactive w/o amine, aldoxime, carbamate [R2:0.79、Q2:0.55、n:6] 3300 mg/L ※S:(構造適用範囲外)	判定不能 (水溶解度情報なし) 予測不能

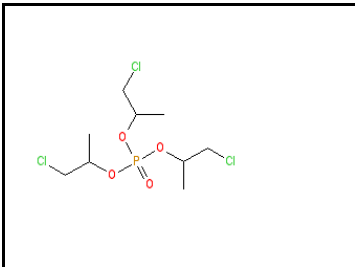
	化学物質	対象	毒性値		
			試験結果	KATE2020 ※7	ECOSAR ※8
3	CAS番号 420-04-2 シアナミド <chem>[N-]#C</chem>	藻類	EC50 9.87 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし) Neutral Organics[MaxLogP=6.4] [R2:0.6782、n:41] 1290 mg/L
		甲殻類	EC50 3.16 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし) Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.7704、n:98] 5080 mg/L
		魚類	LC50 58 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) CN_X nitrile unreactive aliphatic [R2:0.97、Q2:0.95、n:7] 5800 mg/L ※P:(logP適用範囲外) CN_X nitrile unreactive [R2:0.87、Q2:0.84、n:15] 3000 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし) Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.878、n:296] 11600 mg/L
4	CAS番号 593-85-1 炭酸とグアニジンの化合物(1:2) <chem>[NH2]C(=[NH2])N</chem> <chem>OC(=O)O</chem>	藻類	EC50 65 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし) ●Aliphatic Amines[MaxLogP=6.4] [R2:0.7788、n:35] 409 mg/L [cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=6.4] [R2:0.6782、n:41] 6680 mg/L
		甲殻類	EC50 41 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし) ●Aliphatic Amines[MaxLogP=5] [R2:0.7634、n:24] 215 mg/L [cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.7704、n:98] 35800 mg/L
		魚類	LC50 >100 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし) ●Aliphatic Amines[MaxLogP=5] [R2:0.7939、n:90] 2750 mg/L [cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.878、n:296] 88200 mg/L

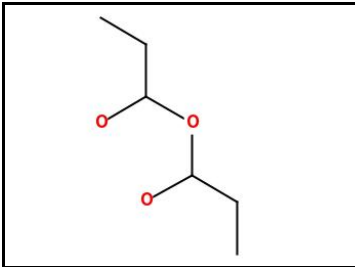
	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	KATE2020 ※7	ECOSAR ※8	
5	MITI番号 5-5235 CAS番号 55965-84-9 2-メチル-4-イソチアゾリン-3-オン  CN1SC=CC1=O 分子量 115.15 水溶解度(実測) mg/L 試験用水への溶解度 藻類 mg/L 甲殻類 mg/L 魚類 mg/L 水溶解度(予測) mg/L logP(KowWin) -0.83※2 logBCFmax ※3 EnergyLUMO ※4 備考: 2-メチル-4-イソチアゾリン-3-オンとして予測	藻類	EC50 0.0237 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	判定不能 (水溶解度情報なし) 予測不能	
		甲殻類	EC50 0.099 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	判定不能 (水溶解度情報なし) 予測不能	
		魚類	LC50 0.129 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	判定不能 (水溶解度情報なし) 予測不能	

6	CAS番号 4420-74-0 3-(トリメトキシシリル)プロパン-1-チオール  CO[Si](CCCS)(OC)OC 分子量 196.34 水溶解度(実測) mg/L 試験用水への溶解度 藻類 mg/L 甲殻類 mg/L 魚類 mg/L 水溶解度(予測) 2616 mg/L logP(KowWin) 1.45 ※2 logBCFmax ※3 EnergyLUMO ※4 備考:	藻類	データなし	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	有害性クラス 2 相当 (水溶解度情報なし) [cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=6.4] [R2:0.6782、n:41] 163 mg/L ----- Thiols and Mercaptans[MaxLogP=2.9] [R2:0.9976、n:3] 0.952 mg/L ----- ● Alkoxy Silanes[MaxLogP=6.4] [R2:0.4347、n:3] 0.873 mg/L -----	
		甲殻類	EC50 6.7 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	有害性クラス 3 相当 (水溶解度情報なし) [cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.7704、n:98] 269 mg/L ----- ● Thiols and Mercaptans[MaxLogP=5] [R2:0.5378、n:6] 1.43 mg/L ----- Alkoxy Silanes[MaxLogP=5] [R2:0.3151、n:6] 11.3 mg/L -----	
		魚類	LC50 439 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし) 判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	有害性クラス 2 相当 (水溶解度情報なし) [cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.878、n:296] 499 mg/L ----- Thiols and Mercaptans[MaxLogP=6.1] [R2:0.9256、n:8] 17.1 mg/L ----- ● Alkoxy Silanes[MaxLogP=5] [R2:0.9542、n:4] 7.14 mg/L -----	

	化学物質	対象	毒性値		
			試験結果	KATE2020 ※7	ECOSAR ※8
7	CAS番号 127-09-3 酢酸ナトリウム	藻類	データなし	判定不能 (水溶解度情報なし)	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし)
			判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	[cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=6.4] [R2:0.6782、n:41] 4400 mg/L	
		甲殻類	EC50 >1000 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし)	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし)
	CC(O)=O	甲殻類		判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	[cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.7704、n:98] 12300 mg/L
分子量 60.05				判定不能 (水溶解度情報なし)	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし)
水溶解度(実測) mg/L		魚類	LC50 >100 mg/L	CNOS_X acid unreactive [R2:0.77、Q2:0.63、n:12] 1200 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	[cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.878、n:296] 25800 mg/L
試験用水への溶解度					
藻類 mg/L					
甲殻類 mg/L					
魚類 mg/L					
水溶解度(予測) 759e+005 mg/L					
logP(KowWin) 0.09※2					
logBCFmax ※3					
EnergyLUMO ※4					
備考:					
Na+を除いて予測					

8	CAS番号 39423-51-3 α -(2-アミノメチル)- ω -ヒドロキシポリ[オキシ(メチルエチレン)]と2-エチル-2-(ヒドロキシメチル)プロパン-1, 3-ジオールのエーテル(3:1)	藻類	EC50 4.4 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし)	有害性クラス 2 相当 (水溶解度情報なし)
			判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	●Aliphatic Amines[MaxLogP=6.4] [R2:0.7788、n:35] 0.931 mg/L	
		甲殻類	EC50 13 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし)	有害性クラス 2 相当 (水溶解度情報なし)
CCC(COCC(C)C)(COCC(C)C)COC(C)N	甲殻類			判定条件(*)を満たすQSARクラスは存在せず。	●Aliphatic Amines[MaxLogP=5] [R2:0.7634、n:24] 1.46 mg/L
分子量 303.48					[cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.7704、n:98] 15.6 mg/L
水溶解度(実測) mg/L	魚類	LC50 >100 mg/L	有害性クラス 2 相当 (水溶解度情報なし)	有害性クラス 3 相当 (水溶解度情報なし)	
試験用水への溶解度			amine primary unreactive NH2=1 aliphatic [R2:0.84、Q2:0.81、n:26] 9.80 mg/L	●Aliphatic Amines[MaxLogP=5] [R2:0.7939、n:90] 10.7 mg/L	
藻類 mg/L				[cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.878、n:296] 24.7 mg/L	
甲殻類 mg/L					
魚類 mg/L					
水溶解度(予測) 259.6 mg/L					
logP(KowWin) 3.12※2					
logBCFmax ※3					
EnergyLUMO ※4					
備考:					

	化学物質	対 象	毒性値		
			試験結果	KATE2020 ※7	ECOSAR ※8
9	CAS番号 13674-84-5 トリス(1-クロロ-2-プロピル) =ホスファート	藻類	EC50 82 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし)	有害性クラス 3 相当 (水溶解度情報なし)
			判定条件(*7)を満たすQSARクラスは存在せず。	●Esters[MaxLogP=6.4] [R2:0.789、n:28] 10.7 mg/L	
	 CC(CCl)O[P](=O)(OC(C)CC)OC(C)CCl 分子量 327.57 水溶解度(実測) mg/L 試験用水への溶解度 藻類 mg/L 甲殻類 mg/L 魚類 mg/L 水溶解度(予測) 43.44 mg/L logP(KowWin) 2.89※2 logBCFmax ※3 EnergyLUMO ※4 備考:	甲殻類	EC50 131 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし)	有害性クラス 1 相当 (水溶解度情報なし)
				判定条件(*7)を満たすQSARクラスは存在せず。	Esters[MaxLogP=5] [R2:0.8124、n:47] 25.4 mg/L
					[cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.7704、n:98] 26.5 mg/L
					● Esters (phosphate)-Withdrawing Substitutions[MaxLogP=5] 0.0986 mg/L
		魚類	LC50 51 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし)	有害性クラス 2 相当 (水溶解度情報なし)
				判定条件(*7)を満たすQSARクラスは存在せず。	Esters[MaxLogP=5] [R2:0.7937、n:102] 11.5 mg/L
					[cf.Baseline Toxicity] Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.878、n:296] 43.0 mg/L
					● Esters (phosphate)-Withdrawing Substitutions[MaxLogP=5] 1.52 mg/L

10	CAS番号 25265-71-8 ジプロピレングリコール		CCC(O)OC(O)CC	分子量 134.17	水溶解度(実測) mg/L	試験用水への溶解度	藻類 mg/L	甲殻類 mg/L	魚類 mg/L	水溶解度(予測) 107e+005 mg/L	logP(KowWin) -0.64※2	logBCFmax ※3	EnergyLUMO ※4	備考: 	藻類	EC50 >100 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし)	CO_X ether unreactive excl. HRAC Ea Alga [R2:0.93、Q2:0.85、n:9] 15000 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	CO_X alcohol unreactive w/o halogen, acid, EO [R2:0.95、Q2:0.9、n:6] 130000 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	narcotic group Alga Acute [R2:0.76、Q2:0.74、n:52] 43000 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし)	Neutral Organics[MaxLogP=6.4] [R2:0.6782、n:41] 3130 mg/L
	甲殻類														EC50 >100 mg/L	判定不能 (水溶解度情報なし)	CO_X ether unreactive [R2:0.83、Q2:0.74、n:15] 10000 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	CO_X alcohol unreactive w/o EO Daphnid [R2:0.78、Q2:0.72、n:14] 4800 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	narcotic group Daphnid Acute [R2:0.71、Q2:0.7、n:83] 1500 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし)	Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.7704、n:98] 11500 mg/L	
	魚類														LC50 >100 mg/L	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし)	●CO_X ether unreactive [R2:0.87、Q2:0.86、n:44] 21000 mg/L	CO_X alcohol unreactive w/o EO Fish [R2:0.89、Q2:0.88、n:46] 50000 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	narcotic group Fish Acute [R2:0.87、Q2:0.87、n:154] 29000 mg/L ※P:(logP適用範囲外)	有害性クラス外相当 (水溶解度情報なし)	Neutral Organics[MaxLogP=5] [R2:0.878、n:296] 25800 mg/L	

化学物質	対象	毒性値		
		試験結果	KATE2020 ※7	ECOSAR ※8

【物理化学的性状の算出方法】
※1 Wskowwin v1.42
※2 KowWin v1.68
※3～6 TIMES v2.32

【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、藻類・甲殻類・魚類試験用水への溶解度）の実測値が得られている場合には、そのうちの最大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、予測値の横に「（水溶解度超）」と示している。
○水溶解度の実測値が得られていない場合
有害性クラス判定結果の下に「（水溶解度情報なし）」と示している。
○水溶解度は参考値として示しており、判定には用いていない。

【有害性クラスの判定方法】

各QSARモデルにおいて利用可能と判断した予測値に対し、以下の条件より利用可能性を判定し、「種間外挿の不確実性」は考慮せず、「急性慢性毒性比(ACR)」及び「室内試験から野外への外挿係数(=10)」を用いて算出したPNECに基づき有害性クラス判定を行った。
予測不能もしくは利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。

【※7 KATE2020v.4.1】

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利用不可とした。
※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がない、もしくは6を超過しており、回帰式の適用領域外である。
※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利用可能とした。
※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がついている予測値のうち、最小値をもって有害性クラスの判定を行った。有害性クラスの判定に用いた予測結果には●マークを付けている。

【※8 ECOSAR2.2】

○ECOSAR2.2では予測するすべての物質に対してNeutralOrganicsクラスの式を用いた予測値を返す。これは物質が有する麻酔性の毒性(narcotic toxicity; 基礎的毒性(baseline toxicity)とも言う)を予測している。一方、麻酔性に加えて過剰毒性(excess toxicity)を示す物質が存在するが、それらの物質に対してもNeutralOrganicsクラスの予測値が返される。また、ECOSARでは分類不能の物質に対してもNeutralOrganicsクラスの式を用いた予測値を返される。そのため、ECOSARの判定は以下を行うこととした。
・複数のクラスの予測結果が出ている場合：NeutralOrganicsの予測は参考として扱い、予測及び判定には用いない。(「cf. baseline toxicity」と表示する)
・NeutralOrganicsのみの予測結果が出ている場合：予測物質がNeutralOrganicsクラスに該当するか確認し、予測及び判定に用いるかどうかを判断する。

○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判定に用いる。
※E(特別な毒性を持つクラス)：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。他のクラスによる予測値が得られている場合でも、本クラスの予測値を使用するのが適切と考えられる。
○ECOSARが「一般的に飽和状態で影響なしと考えられる」とした予測結果は利用可能とした。
※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有害性クラスの判定に用いている。詳細な検討の際には注意が必要となる。なお、MAXlogPの値は各QSARクラスの横に「MaxLogP=○」として示している。
予測対象物質が該当するクラスが複数ある場合には、※E及び※wがついていない予測値のうち、最小値をもって有害性クラスの判定を行った。有害性クラスの判定に用いた結果には●マークを付けている。