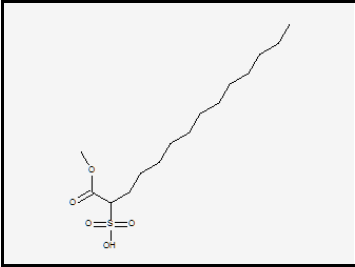
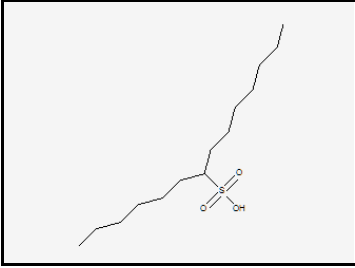
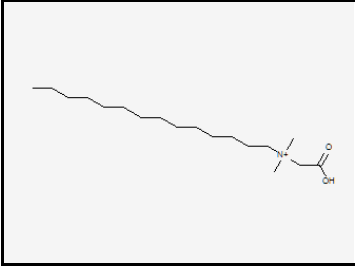
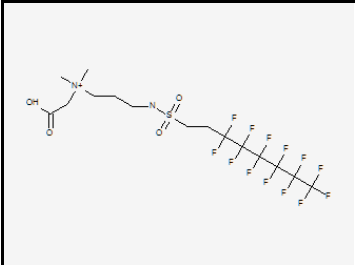
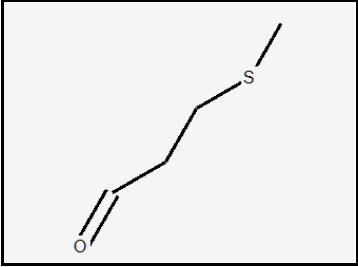
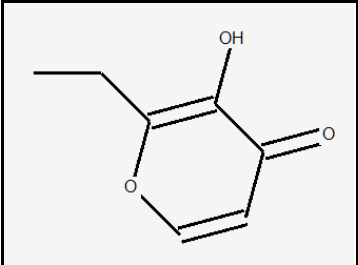


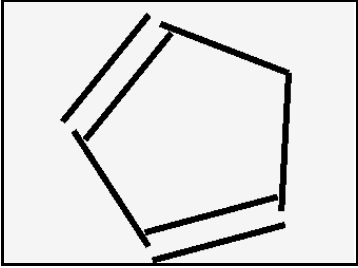
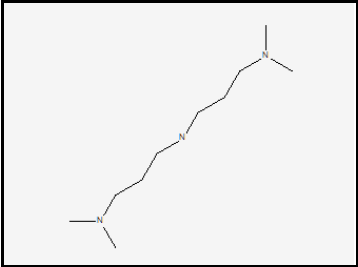
QSAR予測結果 1. 今回新たに有害性クラスの付与を行う物質

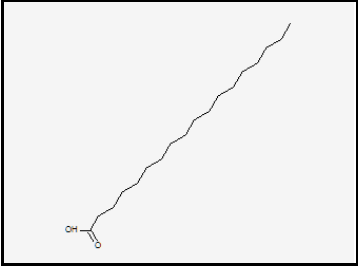
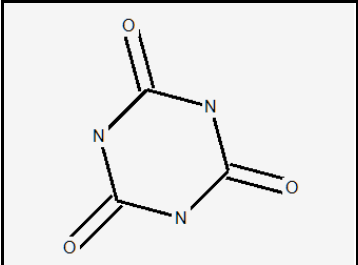
令和2年度第7回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会、令和2年度化学物質審議会第3回安全対策部会、第209回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会  
 令和2年12月11日 資料1-4参考  
 (審議会後確定版)

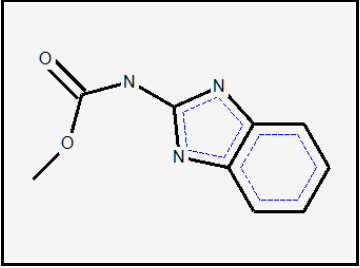
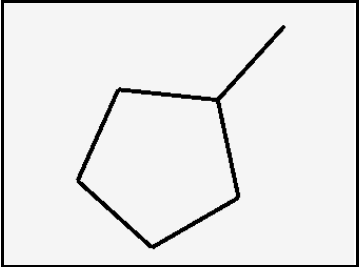
#	化学物質	対象	試験結果	毒性値		
				TIMES※6	ECOSAR※7	KATE※8
1	処理番号 単位検討物質 CAS番号 物質名 ナトリウム=1-メトキシ-1-オキソオクタデカン-2-スルホナート又はナトリウム=1-メトキシ-1-オキソヘキサデカン-2-スルホナート 備考: ナート 評価対象物質はNa塩。  分子量 322.46 対水溶解(mg/L) [実測値] 0.02759 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) 5.229 ※1 logBCFmaxtox 3.88E+0 ※2 LUMO(eV) -1.32E+0~-8.65E-1 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	0.59 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.239 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 Esters-acid 5.61 mg/L ※logP>5.0 (logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.334 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 2.30 mg/L ※P, ※F; 判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
				使用不可 Reactive unspecified 0.139 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 Esters-acid 8.26 mg/L ※logP>5.0 (logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.255 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 29.0 mg/L ※P, ※F; 判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
2	処理番号 単位検討物質 CAS番号 物質名 (アルカン(C=10~18)スルホン酸又はアルカン(C=10~18)ジスルホン酸)のナトリウム塩 備考: Sulfonic acids, C14-sec-alkane, sodium saltsを予測。  分子量 278.45 対水溶解(mg/L) [実測値] 7.214 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) 3.929 ※1 logBCFmaxtox 2.93E+0 ※2 LUMO(eV) -7.77E-1~-6.95E-1 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	1.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2.79 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 42.3 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 17.0 mg/L ※F; 判定不能 (部分構造適用範囲外)
				使用不可 Reactive unspecified 2.14 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 28.7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 48.0 mg/L ※F; 判定不能 (部分構造適用範囲外)

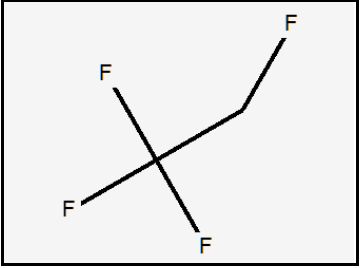
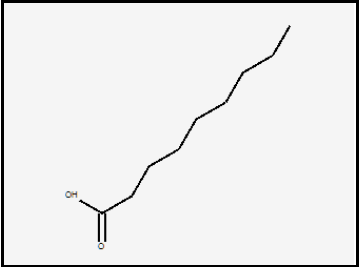
#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
3	処理番号 CAS番号 2601-33-4 物質名 1-Tetradecanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-, inner salt 備考:  分子量 301.52 対水溶解(mg/L) [実測値] 33.35 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) 3.457 ※1 logBCFmaxtox 2.58E+0 ※2 LUMO(eV) -4.4E+0~-4.17E+0 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 1.59 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 122 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
				4.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2.47 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	
4	処理番号 MITI2-4053 CAS番号 物質名 2-[ジメチル[3-(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-トリデカフルオロオクタン-1-スルホンアミド)プロピル]アンモニオ]アセタート 備考: 主成分(95%以上)とする、2-[ジメチル[3 主成分34455-29-3を予測  分子量 572.38 対水溶解(mg/L) [実測値] 2 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) 2.905 ※1 logBCFmaxtox 3.05E+0 ※2 LUMO(eV) -4.68E+0~-4.07E+0 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 0.816 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Amides -acid 385 mg/L Baseline Toxicity 72.4 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
				144 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.11 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	

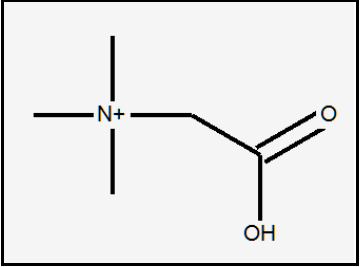
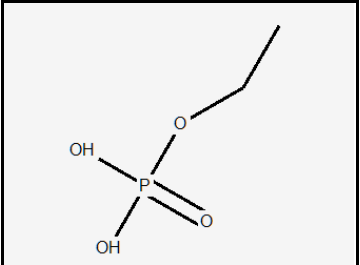
#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
5	処理番号 CAS番号 3268-49-3 物質名 Propanal, 3-(methylthio)- 備考: 	魚類	6.95 mg/L	使用不可 aldehydes 84.0 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 40.4 mg/L ----- Baseline Toxicity 2280 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	7.15 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2220 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 144 mg/L ----- Baseline Toxicity 1120 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
6	処理番号 CAS番号 4940-11-8 物質名 4H-Pyran-4-one, 2-ethyl-3-hydroxy- 備考: 	魚類	> 85 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1500 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 Vinyl/Allyl Ketones 2840 mg/L ----- Vinyl/Allyl Ethers 5.64 mg/L ----- ○ Vinyl/Allyl Alcohols 4.88 mg/L ----- Baseline Toxicity 3900 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 conjugated systems2 17.0 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	27 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3040 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 Vinyl/Allyl Ketones 3210 mg/L ----- Vinyl/Allyl Ethers 909 mg/L ----- ○ Vinyl/Allyl Alcohols 0.591 mg/L ----- Baseline Toxicity 1890 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 conjugated systems2 27.0 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)

#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
7	処理番号 CAS番号 542-92-7 物質名 1,3-Cyclopentadiene 備考: 	魚類	46.5 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 25.9 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 32.1 mg/L	使用可 hydrocabons aliphatic 25.0 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 39.0 mg/L
			甲殻類	5.06 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 26.3 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 18.6 mg/L
8	処理番号 CAS番号 6711-48-4 物質名 1,3-Propanediamine, N3-[3-(dimethylamino)propyl]-N1,N1-dimethyl- 備考: アミン類 	魚類	68 mg/L	使用可 narcotic amines 724 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 545 mg/L Baseline Toxicity 6310 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 secondary or tertiary amines 630 mg/L
			甲殻類	50.3 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 11300 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines 52.7 mg/L Baseline Toxicity 3040 mg/L 判定不能(minimum toxicity)

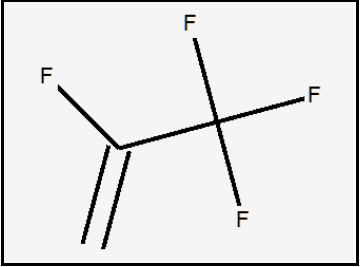
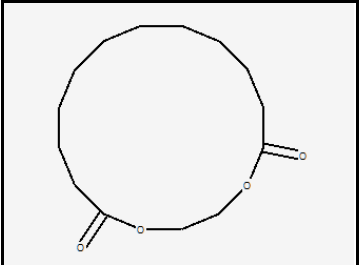
#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
9	処理番号 CAS番号 1592-23-0 物質名 Octadecanoic acid, calcium salt (2:1) 備考: 評価対象物質はCa塩。オクタデカン酸として予測 	魚類	> 2.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.456 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 0.0110 mg/L ※logP>5.0(logP適用範囲外)判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 0.0210 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
				甲殻類	> 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.178 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)
10	処理番号 CAS番号 37640-57-6 物質名 1,3,5-Triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-trione, compd. with 1,3,5-triazine-2,4,6-triamine (1:1) 備考: 混合物 	魚類	> 10000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 64.6 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Triazines, Aromatic 72.0 mg/L Baseline Toxicity 117 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 39.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
				甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 80.5 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)

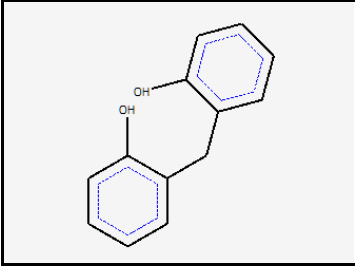
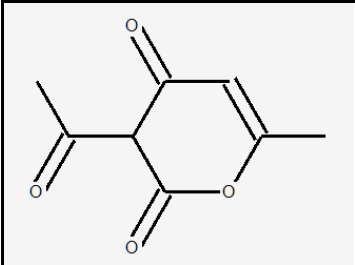
#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES※6	ECOSAR※7	KATE※8
12	処理番号 CAS番号 10605-21-7 物質名 Carbamic acid, N-1H-benzimidazol-2-yl-, methyl ester 備考:  分子量 191.19 対水溶解(mg/L) [実測値] 2441 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) 1.553 ※1 logBCFmaxtox 1.16E+0 ※2 LUMO(eV) -5.26E-1 ~ -1.25E-1 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	0.41 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 183 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OImidazoles 15.3 mg/L ----- Carbamate Esters 56.4 mg/L ----- Baseline Toxicity 396 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	0.36 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 265 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OImidazoles 3.49 mg/L ----- Carbamate Esters 48.6 mg/L ----- Baseline Toxicity 216 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
13	処理番号 MITI3-4669 CAS番号 物質名 メチルシクロペンタン 備考:  分子量 84.16 対水溶解(mg/L) [実測値] 49.37 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) 3.102 ※1 logBCFmaxtox 2.31E+0 ※2 LUMO(eV) 3.62E+0 ~ 3.65E+0 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	6.4 mg/L	使用可 basesurface narcotics 25.3 mg/L	使用可 Neutral Organics 7.08 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 7.30 mg/L ----- Neutral Organics 9.60 mg/L
		甲殻類	1 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 12.3 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4.45 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 1.80 mg/L ----- Neutral Organics 3.80 mg/L

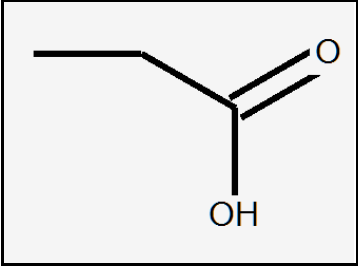
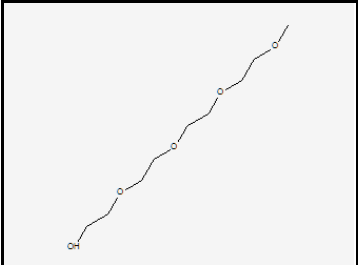
#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
14	処理番号 MITI2-3585 CAS番号 811-97-2 物質名 1, 1, 1, 2-テトラフルオロエタン 備考: 	魚類	450 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 148 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 162 mg/L	使用不可 hydrocabons aliphatic 100 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 180 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	980 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 162 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 89.6 mg/L	使用不可 hydrocabons aliphatic 11.0 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び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)
15	処理番号 CAS番号 112-05-0 物質名 Nonanoic acid 備考: 	魚類	46.5 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7.32 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 55.6 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 acids 19.0 mg/L
		甲殻類	51.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4.72 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 36.3 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 acids 34.0 mg/L

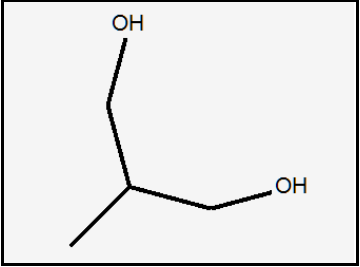
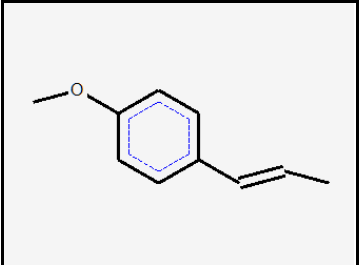
#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
17	処理番号 CAS番号 107-43-7 物質名 Methanaminium, 1-carboxy-N,N,N-trimethyl-, inner salt 備考:  分子量 119.16 対水溶解(mg/L) [実測値] 1000000 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) -2.928 ※1 logBCFmaxtox -2.18E+0 ※2 LUMO(eV) -4.55E+0 ~ -4.52E+0 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 92200 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 2.61e+7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 2.10e+7 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	4335 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 901000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 9390000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 1900 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
18	処理番号 CAS番号 1623-14-9 物質名 Phosphoric acid, monoethyl ester 備考:  分子量 126.05 対水溶解(mg/L) [実測値] 147600 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) -0.223 ※1 logBCFmaxtox -1.66E-1 ※2 LUMO(eV) 5.21E-1 ~ 7.51E-1 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 5220 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 10300 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 phosphates 17000 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 8600 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 10600 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 4750 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 phosphates 730 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 870 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)



#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
19	処理番号 MITI2-4136 CAS番号 物質名 2, 3, 3, 3-テトラフルオロプロパ-1-エン 備考: 	魚類	> 200 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 40.6 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 68.9 mg/L	使用不可 hydrocabons aliphatic 52.0 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 82.0 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			甲殻類	> 100 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 47.4 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 39.7 mg/L
21	処理番号 CAS番号 54982-83-1 物質名 1,4-Dioxacyclohexadecane-5,16-dione 備考: 	魚類	0.88 mg/L	使用可 esters 1.96 mg/L	使用可 OEsters 1.73 mg/L Baseline Toxicity 2.13 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 esters aliphatic 1.50 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	> 14 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.56 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 OEsters 2.83 mg/L Baseline Toxicity 1.49 mg/L 判定不能(minimum toxicity)

#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
22	処理番号 CAS番号 1333-16-0 物質名 Phenol, methylenebis- 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 phenols and anilines 7.61 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OPhenols, Poly 2.52 mg/L ----- Baseline Toxicity 18.6 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols4 6.70 mg/L -----
				甲殻類	8.7 mg/L	使用不可 phenols and anilines 6.87 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)
23	処理番号 CAS番号 520-45-6 物質名 2H-Pyran-2,4(3H)-dione, 3-acetyl-6-methyl- 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 578 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 Esters 116 mg/L ----- Vinyl/Allyl Ketones 1460 mg/L ----- O Vinyl/Allyl Esters 1.98 mg/L ----- Baseline Toxicity 1730 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 conjugated systems2 14.0 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) -----
				甲殻類	> 88.4 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1110 mg/L 判定不能(minimum toxicity)

#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
25	処理番号 CAS番号 137-40-6 物質名 Propanoic acid, sodium salt (1:1) 備考: 評価対象物質はNa塩  分子量 74.08 対水溶解(mg/L) [実測値] 173600 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) 0.578 ※1 logBCFmaxtox 4.31E-1 ※2 LUMO(eV) 1.02E+0~1.03E+0 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	4740 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 843 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 11500 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	> 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1260 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 5740 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
26	処理番号 CAS番号 23783-42-8 物質名 3,6,9,12-Tetraoxatridecan-1-ol 備考:  分子量 208.26 対水溶解(mg/L) [実測値] 1000000 [試験用水への水溶解度] logP(KowWin) -1.73 ※1 logBCFmaxtox -1.29E+0 ※2 LUMO(eV) 1.9E+0~2.61E+0 ※3 ODDI ※4 Qc ※5	魚類	> 20000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 260000 mg/L ※D;判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 383000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 570000 mg/L ※P, ※f;判定不能(logP適用範囲外,麻酔作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 260000 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	22900 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 654000 mg/L ※D;判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 154000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 31000 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 14000 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
27	処理番号 MITI2-3203 CAS番号 物質名 2-メチル-1, 3-プロパンジオール 備考: 	魚類	> 1000 mg/L	使用可 basesurface narcotics 13100 mg/L	使用可 Neutral Organics 8450 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 14000 mg/L Neutral Organics 7000 mg/L
			甲殻類	> 1000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 17800 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3880 mg/L
29	処理番号 CAS番号 4180-23-8 物質名 Benzene, 1-methoxy-4-(1E)-1-propen-1-yl- 備考: 	魚類	7 mg/L	使用可 basesurface narcotics 5.80 mg/L	使用可 Neutral Organics 6.90 mg/L	使用不可 ethers with aromatic 4.90 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 9.70 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			甲殻類	4.25 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 4.56 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4.45 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※6	ECOSAR ※7	KATE ※8
	<p>有害性クラス判定            QSARクラス複数該当の場合は、下記順番で条件に合う値(○印付記)を用いて評価。ただし、水溶解度実測値が得られている場合のみ評価。(水又魚類培地への溶解度は、両方得られている場合は 魚類培地への溶解度を優先)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>※P,※F,※D,※N(判定不能)が無いクラスの予測結果</li> <li>※f(判定留意)が無いクラスの予測結果(KATEのみ)</li> <li>より限定されたクラスの予測結果</li> <li>Neutral Organicsクラス以外の予測結果</li> <li>より予測値が小さいクラスの予測結果</li> </ul> <p>予測結果の信頼性の低い以下のクラスは判定不能とした。            判定不能(信頼性の低いクラス)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>※KATE:Unclassified</li> </ul> <p>判定不能(minimum toxicity)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>※TIMES:Reactive Unspecified</li> <li>※ECOSAR:Baseline toxicity, Baseline toxicity(Acid)</li> </ul> <p>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)</p> <p>ECOSARでは各QSAR式の定める最大logP値を超える場合「飽和状態で影響なし」としているため、「有害性クラス外相当」とする。</p>	<p>※1 KowWin v1.68により算出            ※2~6 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 orbita l            BCFmaxtox : the maximum bioconcentration factor            ODDI: the donor delocalizability of the aldehyde O-atom            QC : the charge of the C atom from <math>\alpha</math>, <math>\beta</math> - unsaturated alcohols</p> <p>※7 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※1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。</p> <p>※8 KATE on NET 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※1を使用.</p> <p>※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。&lt;使用不可&gt;            ※D: Out of Domain (TIMES) &lt;使用不可&gt;            ※N: Not Related to an Existing ECOSAR Class Definition (ECOSAR)&lt;使用不可&gt;            ※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)&lt;使用不可&gt;            ※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)&lt;使用留意&gt;</p>				