

カテゴリーアプローチによる
生物濃縮性予測に関する報告書
[水素結合ドナーによる水素結合性
相互作用が受動拡散に影響を与える物質群]

nite

平成 23 年 12 月 22 日

(独) 製品評価技術基盤機構

化学物質管理センター

実施体制

本報告書に記載されている「水素結合性ドナーによる水素結合性相互作用が受動拡散に影響を与える物質群」(以下、カテゴリーII-Bという。)は、NITE 構造活性相関委員会においてレビューが行われた。当委員会の委員名簿と開催記録を以下に示す。

構造活性相関委員会名簿

米澤 義堯(委員長)	(独)産業総合技術研究所 安全科学研究部門 客員研究員
赤松 美紀	京都大学大学院 農学研究科 准教授
内田 直行	日本大学 生物資源科学部 教授
大川 秀郎	神戸大学 名誉教授
齋藤 昇二	住友化学株式会社 生物環境科学研究所 上席研究員
茂岡 忠義	横浜国立大学大学院 環境情報研究院 客員教授
田中 明人	兵庫医療大学 薬学部 教授

開催記録

平成 22 年度	第 1 回構造活性相関委員会(平成 22 年 7 月 12 日)
	第 2 回構造活性相関委員会(平成 22 年 11 月 15 日)
	第 3 回構造活性相関委員会(平成 23 年 3 月 10 日)
平成 23 年度	第 1 回構造活性相関委員会(平成 23 年 7 月 28 日)

本報告書に関する連絡先

(独)製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター
安全審査課 構造活性相関チーム宛
E-mail: safe@nite.go.jp

目次

1.	はじめに	1
2.	生物濃縮性におけるカテゴリーの考え方	2
3.	カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の考え方	3
4.	カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の定義	6
5.	カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の生物濃縮性予測手法の検討	8
5-1.	カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の生物濃縮性予測の基本的な考え方	8
5-2.	カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の予測式による生物濃縮性予測の検討	8
5-3.	カテゴリーⅡ-Bに該当する物質のRead-across(類推)による生物濃縮性予測の検討	16
5-4.	Read-across(類推)による生物濃縮性予測が可能な物質群の例及びその適用範囲について	22
5-5.	分子構造や物性の類似性を考慮した「基本骨格」を考慮したRead-across(類推)を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群について	26
6.	カテゴリーⅡ-Bに該当する未点検既存化学物質の生物濃縮性予測例	54
7.	既存の構造活性相関ソフトウェアによる予測結果	58
8.	解析に使用したデータ及びソフトウェア	61
9.	参考文献	62
別添1		
1.	化学物質の魚体中への取り込みと排出の考え方	64
2.	化学物質の生物濃縮性(logBCF)とlogPowの関係	64
3.	カテゴリーⅠ及びⅡ-Aに該当する物質とカテゴリーⅡ-Bに該当する物質におけるlogPowとlogBCFとの相関の違いについて	65
4.	カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の重回帰分析結果	68
別添2		
1.	カテゴリーⅡ-Bに該当する生物濃縮性が既知の化審法既存化学物質のリスト(全144物質)	74
	トレーニングセット(化審法既存化学物質(全144物質))	74
	トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質66物質))	98
	トレーニングセット(化審法既存化学物質(塩基性物質48物質))	109
	トレーニングセット(化審法既存化学物質(中性物質33物質))	117
2.	Read-acrossによる生物濃縮性予測の検討を行ったカテゴリーⅡ-Bに該当する物質のリスト	123
	カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満のフェノール(既存化学物質39物質)	123
	カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%以上のフェノール(既存化学物質24物質)	130

カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール (既存化学物質 16 物質)	134
カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール (既存化学物質 23 物質)	137
カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香環を 1 つのみ持つフェノール(既存化学物質 9 物質)	141
カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香環を 2 つ持つフェノール(既存化学物質 9 物質)	143
カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のその他の 構造を持つフェノール(既存化学物質 5 物質)	145
カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のヒドロキシ ル基のオルト位に 2 つの置換基を持つ単環フェノール(既存化学物質 6 物質)	146
カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール (既存化学物質 20 物質)	147
カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール (既存化学物質 17 物質)	151
カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール (既存化学物質 4 物質)	154
カテゴリー II -B に該当する芳香族 1 級及び 2 級アミン(既存化学物質 44 物質)	155
イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学 物質 24 物質)	163
イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の単環アルキルアニリン(既存化学物質 17 物質)	167
イオン存在割合 10%未満 かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化 学物質 19 物質)	170
イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のジフェニルメタン骨格またはビフェニル 骨格を持つ芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 5 物質)	174
イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のトリアジン骨格を持つ芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 2 物質)	175
イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のアントラキノン骨格を持つ芳香族 1 級ま たは 2 級アミン(既存化学物質 2 物質)	175
カテゴリー II -B に該当する $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の脂肪族アルコール(既存化学物質 8 物質)	176
カテゴリー II -B に該当する $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の脂肪族アルコール(既存化学物質 4 物 質)	178
カテゴリー II -B に該当する $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族アルコール(既存化学物質 3 物 質)	179
カテゴリー II -B に該当する $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族アルコール(既存化学物質 4 物 質)	180
3. カテゴリー II -B に該当する未点検既存化学物質のリスト	181

1. はじめに

これまで我が国における化学物質の安全性評価は、昭和 48 年に施行された「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律」(以下「化審法」という。)に基づいて審査されてきた。この化審法により、我が国で製造または輸入が行われたことのない新規化学物質は、製造者あるいは輸入者からの届出に基づき事前に審査と判定が行われている。通常は化学物質の安全性評価にかかわる試験結果(生分解性、蓄積性、スクリーニング毒性(ヒト毒性、生態毒性))を届出者が提出し、国はこれをもとに審査及び判定を行っている^{*}。また、化審法第 2 条に規定されている法律制定以前の既存化学物質(約 2 万物質)の生分解性・蓄積性に係る実測試験は国が行ってきたが、これまでに取得された実測データは 2,000 物質に満たない。これらの実測試験を行うには膨大な時間・労力・経費がかかるため、実測試験に代わる方法としてカテゴリーアプローチや構造活性相関手法の活用が検討されている。

独立行政法人製品評価技術基盤機構(以下「NITE」という。)は、これらの実測試験に代わる方法として構造活性相関手法に関する取り組みを開始し、平成 16 年度に NITE 内で設立された構造活性相関委員会において、生分解性・蓄積性における構造活性相関手法の活用について検討を開始した。平成 16、17 年度に生分解性・蓄積性における構造活性相関モデルの調査及び既存のソフトウェアのバリデーション¹⁾と選定を行い、平成 17~19 年度に選定した構造活性相関ソフトウェアによる未点検既存化学物質の実測試験の優先順位付けを行った。この結果は、未点検既存化学物質における実測試験実施物質の選定に役立てられた。平成 19 年度~現在においては、未点検既存化学物質の優先順位付けに限らず、化学物質のリスク評価におけるハザード評価の第一段階として用いることができる生分解性・蓄積性の構造活性相関手法について検討を行っており、特に現在世界的に検討が進められている“カテゴリーアプローチ”を活用した予測手法について検討を行っている。

本報告書は、化審法の既存化学物質安全性点検の濃縮度試験データ²⁾を基に、NITE で蓄積性におけるカテゴリーアプローチの検討を行い、カテゴリー I : 単純受動拡散カテゴリー(2009 年 10 月に公表)³⁾、カテゴリー II - A : 水素結合性アクセプターによる双極子-双極子相互作用が受動拡散に影響を与える物質群(2010 年 12 月に公表)⁴⁾に続いて、カテゴリー II - B : 水素結合性ドナーによる水素結合性相互作用が受動拡散に影響を与える物質群に分類される化学物質の定義及び予測方法について、報告書としてまとめたものである。

※ただし、届出に基づく事前審査の結果、難分解性ではあるが高蓄積性ではないと判定された製造・輸入数量の国内総量が年間 10 トン以下であるもの、予定されている取扱方法等から見て環境汚染が生じるおそれがないもの(中間物、閉鎖系等用途、輸出専用品)または我が国での製造・輸入数量が年間 1 トン以下であるもの(少量新規化学物質)については、製造・輸入者からの申出に基づいて国の事前確認を受けた場合には、特例として製造・輸入が可能となる。

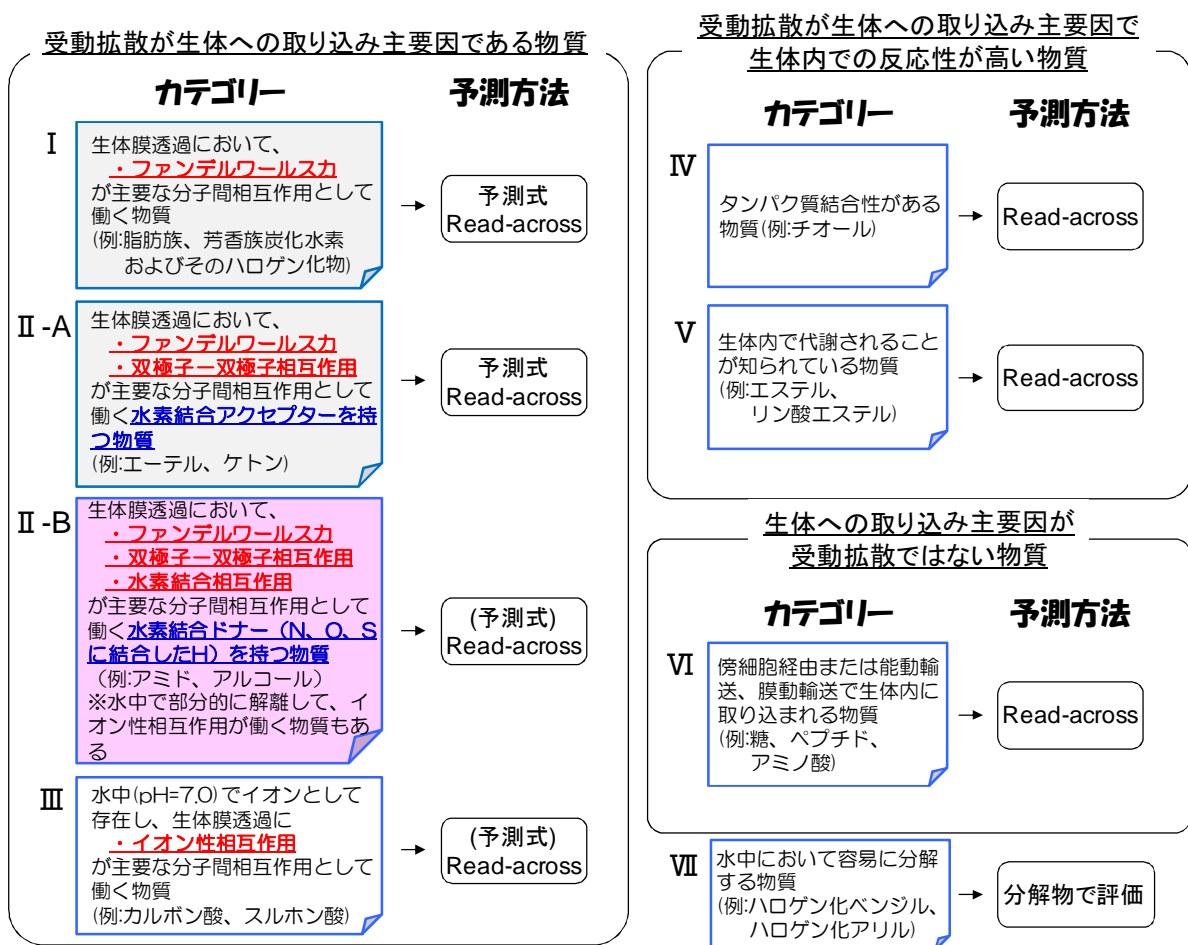
2. 生物濃縮性におけるカテゴリーの考え方

化学物質の生体内への取り込みは、主に①受動拡散、②傍細胞経由、③能動輸送、④膜動輸送によって起こると考えられており、大部分の物質は①受動拡散によって生体内に取り込まれる(3. 参照)。この受動拡散による化学物質の拡散は、理論的には Fick の第 1 法則に従い、水和している水分子や生体膜中の生体分子との分子間相互作用の影響を受けると考えられる。また、化学物質の生体内への蓄積と生体内からの排出(排泄)には、脂質に溶解したときの安定性、生体内での反応性(タンパク質結合性、生体内における代謝)などが影響を与える。タンパク質結合性を有する物質は、タンパク質との結合により生体内に蓄積され、代謝反応によって代謝物を生成する物質は、生体内から排出され易いことが想定される。

化学物質に水和している水分子及び生体分子との分子間相互作用としては、主にファンデルワールス力、双極子-双極子相互作用、水素結合性相互作用(水素結合性ドナーまたはアクセプター)、イオン性相互作用が考えられる(3. 参照)。生体膜透過における双極子-双極子相互作用及び水素結合性相互作用の影響として、物質が生体膜中に取り込まれる際の水素結合の開裂に伴うエネルギーの損失や生体膜中のリン脂質等の生体分子との分子間相互作用による拡散速度の低下などが考えられる⁵⁾。また、水素結合性相互作用が生体膜透過に与える影響として、創薬の世界でよく知られている法則の一つに「Lipinski のルールオブファイブ」があり、「水素結合性アクセプター」よりも「水素結合性ドナー」を多数持つ物質の方が、生体膜を透過しにくいことが経験的に知られている⁶⁾。生体膜透過におけるイオン性相互作用の影響としては、水素結合性相互作用の場合と同様に、水素結合の開裂に伴うエネルギーの損失、生体膜中の生体分子との分子間相互作用による拡散速度の低下に加えて、水和による見かけ上の分子容積の増大に伴う拡散速度の低下、生体膜表面におけるリン脂質のアニオンとの静電的相互作用なども想定される。

上述のことを考慮すると、化学物質の生体内への取り込みメカニズム、水中及び生体中での分子間相互作用(水和している水分子及び生体分子との分子間相互作用)、生体内における反応性(タンパク質結合性、生体内における代謝)の違いによって、化学物質の生物濃縮挙動は異なる。これらの違いによって物質を大まかに分類すると、生物濃縮性におけるカテゴリー分類は Scheme 1 のようになると考えられる。

化学物質の生体内への取り込みは、生体膜透過におけるメカニズムと分子間相互作用の違い(3.参照)によって挙動が異なるため、それぞれを別カテゴリーとして考える必要がある。(Scheme 1 の I～III、VI)。また、生体内での反応性が高い物質は、タンパク質との結合による生体内への蓄積や代謝反応によって生体内から排出され易いことが考えられるため、これらの物質も別カテゴリーとして取り扱う必要がある(Scheme 1 のIV、V)。「水中において容易に分解する物質」は、分解物で生物濃縮性を評価する必要がある(Scheme 1 のVII)。



* 物質によっては複数のカテゴリーに該当するものもある。

Scheme 1 生物濃縮性におけるカテゴリー分類の全体像(イメージ)

3. カテゴリーII-Bに該当する物質の考え方

魚類における濃縮度試験において、化学物質の魚体内への取り込みは、主に鰓の生体膜を透過することによって起こると考えられている。鰓の生体膜からの透過機序としては、主に以下の4つの経路が考えられる^{7),8),9),10)}。

- ① 呼吸細胞経由の濃度勾配(受動拡散)による取り込み
- ② 傍細胞経由による取り込み
- ③ 非呼吸細胞(塩類細胞など)経由の能動輸送による取り込み
- ④ 膜動輸送による取り込み

一般的な化学物質は呼吸細胞経由の濃度勾配(受動拡散)によって、生体内に取り込まれる(透過機序①)。①のメカニズムにおいては、分子の疎水性が重要な因子となる。また、生体膜には細孔が存在し、分子サイズが小さい水溶性の物質は、この細孔を水分子と共に透過することで生体内に取り込まれる(透過機序②)。この細孔の大きさは直径 約 4Åで、水の吸収に伴って拡大すると推測されている⁹⁾。一方、ごく一部の生体に必要な物質またはタンパク質は、単純な拡散ではなく、トランスポーターによる特異的な輸送機構(透過機序③)やエンドトーチスと呼ばれる細胞表面で生体膜の一部が陥入し、物質が膜内に取り込まれる過程(透過機序④)を経て、生体内に取り込まれる¹⁰⁾。

ここで①のメカニズムが取り込みの支配要因となる物質の魚類における生物濃縮性 ($\log BCF^{*1}$)は、化学物質の疎水性を表すパラメータの一つである $\log Pow^{*2}$ と相関があることがよく知られている^{11),12)}。理論上、 $\log Pow$ と $\log BCF$ が特に良好な相関を持つ物質は、物質の生体膜透過における濃度勾配以外の影響因子が少ない、すなわち水中の水分子、生体膜分子との分子間相互作用が弱い物質であると考えられる(別添1の1. 及び2. 参照)。

生体膜透過における化学物質と生体膜分子との分子間相互作用は、大まかに A.ファンデルワールス力、B.双極子-双極子相互作用、C.水素結合性相互作用、D.イオン性相互作用の4つに分類される。4つの分子間相互作用における静電的相互作用と静電的相互作用エネルギーの理論式を Table 1 に示す。

Table 1 分子間相互作用における静電的相互作用と静電的相互作用エネルギーの関係^{13),14),15)}

分子間相互作用	分子間相互作用において主に働く静電的相互作用	静電的相互作用エネルギーの理論式	分子間相互作用エネルギーの大きさ [kJ mol ⁻¹]
A.ファンデルワールス力	誘起双極子-誘起双極子	$V \propto \frac{\alpha\alpha'}{r^6}$ (1)	< 1
B.双極子-双極子相互作用	双極子-双極子	$V \propto \frac{\mu^2\mu'^2}{r^6}$ (2)	< 2
C.水素結合性相互作用	水素結合	不詳	10~30
D.イオン性相互作用	イオン-イオン	$V \propto \frac{qq'}{r}$ (3)	400~4000

$$\left[\begin{array}{l} V : \text{相互作用エネルギー、} r : \text{2分子間の距離} \\ \alpha : \text{分極率、} \mu : \text{双極子モーメント、} q : \text{点電荷} \end{array} \right]$$

Aは分散力(誘起双極子-誘起双極子の静電的相互作用)に起因する力¹³⁾、Bは配向力(双極子-双極子の静電的相互作用)に起因する力である^{13),14),15)}。CはBの一種とも考えることができる力で、電気陰性度が高い酸素原子や窒素原子などに結合した水素が正電荷に分極されることによって、配向力が特に強く働くことに起因した力である。Dは2つの荷電した原子に働くクーロン力(イオン-イオンの静電的相互作用)に起因する力で、分子間相互作用の中でも特に強い力である。

一般的に $A < B < C < D$ の順で右にいくほど分子間相互作用が強く、Aが主要な分子間相互作用として働く物質(カテゴリーⅠ：単純受動拡散カテゴリー)は、物質の生体膜透過における濃度勾配以外の影響因子が少なく、 $\log Pow$ と $\log BCF$ が良好な相関を持つ³⁾。一方、Aに加えてB及びCが働く物質(カテゴリーⅡ)、Dが働く物質(カテゴリーⅢ)は、カテゴリーⅠに該当する物質よりも生体膜透過における分子間相互作用が強く働き、 $\log Pow$ と $\log BCF$ との相関性に影響を及ぼす(すなわち相関性が低下する)可能性がある。また、B及びCが働く物質において、水素結合性アクセプターと水素結合性ドナーを持つ物質では、生体膜透過における影響が異なることが経験的に知られている。

また、生体膜は一般的にタンパク質とリン脂質(ホスファチジルコリン(PC)、ホスファチジルセリン(PS)、ホスファチジルエタノールアミン(PE)など、Fig.1 参照)によって構成されてい

る。カテゴリー I ~ III に該当する物質の生体膜透過において、主に作用する分子間相互作用の種類とそれに関わる化学物質の官能基のタイプ及び生体分子の部分構造との関係を Table 2 に示す^{13),14)}。

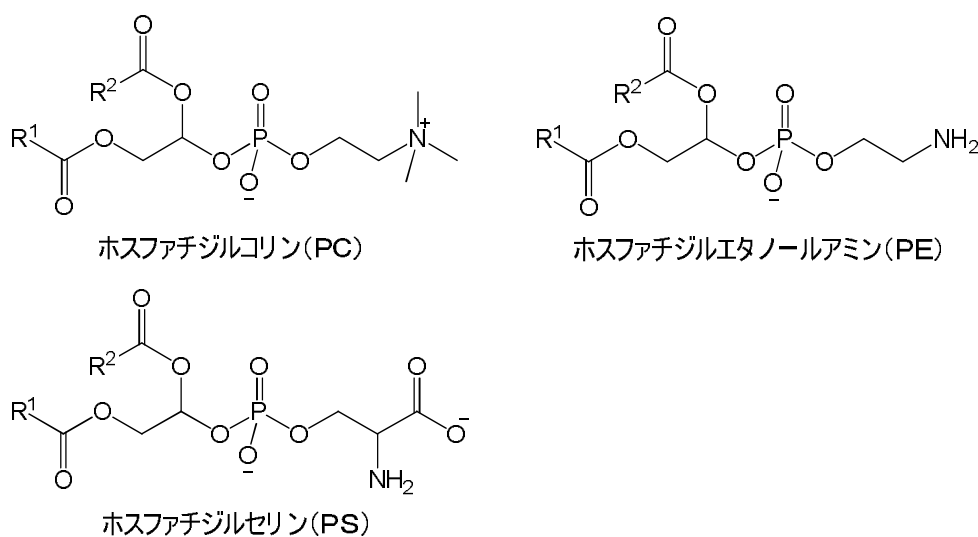


Fig.1 生体膜におけるリン脂質の物質例(R¹、R²：鎖状炭化水素(C=4-30))

Table 2 生物濃縮性におけるカテゴリーと生体膜透過において主に作用する化学物質の官能基のタイプと生体分子の部分構造との関係^{13),14)}

カテゴリー	生体膜透過において主に作用する物質の部位		分子間相互作用
	化学物質	生体膜 [相互作用する官能基]	
I	非水素結合性部位	非水素結合性部位 [リン脂質の疎水性部分など]	◎ファンデルワールスカ
II-A	官能基の極性部位	官能基の極性部位 [リン脂質のエステル基など]	ファンデルワールスカ ◎双極子-双極子相互作用
II-B	水素結合性ドナー (水素結合性アクセプター)	水素結合性アクセプター [リン脂質のエステル基など] (水素結合性ドナー[PEのアミノ基など])	ファンデルワールスカ 双極子-双極子相互作用 ◎水素結合性相互作用
III	イオン性部位	イオン性相互作用部位 [PSのカルボキシル基など]	◎イオン性相互作用

◎：生物濃縮性において主に働くと考えられる分子間相互作用

カテゴリー II-B に該当する物質は、生物濃縮性においてファンデルワールスカ、双極子-双極子相互作用、水素結合性相互作用が働くため、ファンデルワールスカが主要な分子間相互作用として働く物質(カテゴリー I)または双極子-双極子相互作用が主要な分子間相互作用として働く物質(カテゴリー II-A)の場合とは異なる生物濃縮挙動(logPow と logBCF との関係)を持つ傾向にある(別添 1 の 3. 参照)。カテゴリー II-B に該当する物質は、生体膜透過において生体膜成分(PC、PS、PE などの物質)や水中の水分子との間に水素結合性相互作用が働く。そのため、logPow において生体分子の代替物(Surrogate)として用いられている 1-オクタノールのアルコール基(-OH)のみでは、生体膜成分に含まれるアミノ基(-NH₂、-NHR、-NRR')などの生体分子の多種多様な官能基の水素結合性相互作用の多くを記述できなくなり、

カテゴリー I 及び II-A に該当する物質の場合とは異なる生物濃縮挙動(logPow と logBCF との関係)を持つと考えられる(別添 1 の 2. 参照)。また、カテゴリー II-B に該当する物質の生物濃縮性に影響を与える水素結合性相互作用以外の要因として、カテゴリー II-B に該当するペンタクロロフェノールなどの水中で部分的に解離してイオンとして存在する物質の生体膜透過にイオン性相互作用が働くことやカテゴリー II-B に該当するアミン、アルコール、フェノールなどの物質のように肝臓や腸管における代謝の第 1 相反応及び第 2 相反応が生物濃縮性に影響することなども考えられる。

以上のことから、水素結合性ドナーを持つカテゴリー II-B に該当する物質は、生物濃縮性における濃度勾配以外因子(水素結合性相互作用、代謝)の影響が大きく、生物濃縮挙動(logPow と logBCF との関係)がカテゴリー I 及び II-A に該当する物質とは異なると考えられるため、カテゴリー I 及び II-A とは別に定義することとする。ただし、カテゴリー II-B に該当する一部の物質は、水中でイオンとして存在する可能性があるため、イオン性相互作用の影響を考慮して生物濃縮性予測手法の検討を行う。

注:A.ファンデルワールス力は厳密には、分散力(誘起双極子-誘起双極子の静電的相互作用)、誘起力(誘起双極子-双極子の静電的相互作用)、配向力(双極子-双極子の静電的相互作用)の 3 つに起因する力と定義されるが、誘起力と配向力の寄与は分散力と比較すると極めて小さいため、ここでは考慮していない。

- * 1 化学物質の魚体中濃度と水中濃度との比([魚体中濃度]/[水中濃度])の対数値
- * 2 水と1-オクタノールの2つの溶媒層に化学物質を加えて、平衡に達したときの濃度比([1-オクタノール中の化学物質の濃度]/[水中の化学物質の濃度])の対数値

4. カテゴリー II-B に該当する物質の定義

水素結合性の官能基を持つ物質(以下、カテゴリー II-B)は、化学物質と生体分子との相互作用において、ファンデルワールス力、双極子-双極子相互作用、水素結合性相互作用が主要な分子間相互作用として働く水素結合性ドナーを持つ物質と定義する。

水素結合性ドナーを持つ一部の物質は、濃縮度試験における試験水中で部分的に解離してイオンとして存在する物質が含まれている。水中でイオンとして存在する物質は、化学物質と生体分子との分子間相互作用が異なると考えられるため、カテゴリー II-B に該当する物質は、次のとおり酸性物質、塩基性物質、両性物質及び中性物質の 4 つのサブカテゴリーに分類して、化学物質の生物濃縮性予測手法について検討を行う。

酸性物質	水中で解離した場合にアニオンとして存在する可能性がある物質
塩基性物質	水中で解離した場合にカチオンとして存在する可能性がある物質
両性物質	水中で解離した場合に両性イオンとして存在する可能性がある物質
中性物質	水中における官能基の解離性が弱く、水中では解離しないと考えられる物質

今回の検討に用いた化審法既存化学物質 371 物質(8. 参照、以下ベースデータセット)では、以下の官能基(i)~(xv)を持つ 144 物質(別添 2 の Table 1-1)がカテゴリー II-B に該当することを確認した。カテゴリー II-B に該当する全 144 物質の logBCF 値及び物理化学的性状値を別添 2 の Table 1-1 に示す。

<p><u>酸性物質</u></p> <p>(i) フェノール(63 物質)</p> <p>(ii) 芳香族イミド化合物(2 物質)</p> <p>(iii) ピリミジノール化合物(1 物質)</p>
<p><u>塩基性物質</u></p> <p>(iv) 芳香族 1 級または 2 級アミン(44 物質)</p> <p>(v) 脂肪族 1 級または 2 級アミン(3 物質)</p> <p>(vi) ベンジルアミン(1 物質)</p>
<p><u>両性物質</u></p> <p>(vii) ヒドロキシアミン化合物(1 物質)</p>
<p><u>中性物質</u></p> <p>(viii) 脂肪族 1 級または 2 級または 3 級アルコール(12 物質)</p> <p>(ix) 芳香族 1 級または 2 級または 3 級アルコール(7 物質)</p> <p>(x) 芳香族 1 級または 2 級アミド化合物(4 物質)</p> <p>(xi) 芳香族 1 級または 2 級スルホンアミド化合物(4 物質)</p> <p>(xii) 脂肪族 1 級または 2 級アミド化合物(3 物質)</p> <p>(xiii) 脂肪族または芳香族シリルアルコール(2 物質)</p> <p>(xiv) オキシム化合物(1 物質)</p> <p>(xv) ヒドロペルオキシド化合物(1 物質)</p>

* 括弧内の数字は、144 物質における該当物質数。複数の官能基を持つ物質は重複(5 物質)しており、合計すると 149 物質になる。

また、当機構におけるカテゴリーアプローチによる化学物質の生物濃縮性予測の検討結果から、カテゴリー I 及びカテゴリー II - A*に該当する物質は、生物濃縮性における化学物質と生体分子との分子間相互作用が弱く、類似の生物濃縮性を示す。従って、カテゴリー I 及びカテゴリー II - A に該当する物質の置換基(1)~(11)は、生物濃縮性に与える影響が小さいと考えられる。このことから、カテゴリー II - B には(i)~(xv)の置換基のみを持つ物質だけではなく、(i)~(xv)かつ(1)~(11)の置換基を持つ物質も該当すると考えられる。

- (1) 脂肪族または芳香族炭化水素基
- (2) ハロゲン基
- (3) 3 級アミン及び 3 級アミド基
- (4) エーテル基
- (5) ケトン基
- (6) ジアゾ基
- (7) スルフィド基及びジスルフィド基
- (8) スルホニル基
- (9) ニトロ基
- (10) ニトロソアミン基

- (11) ピリジン、ピペリジン、モルホリン、フラン、チオフェン、
チアゾール(ただし H と結合した N を持つ物質を除く)

※カテゴリー I : 化学物質と生体分子との相互作用においてファンデルワールス力が主要な分子間相互作用として働く物質群³⁾、カテゴリー II - A : 化学物質と生体分子との相互作用においてファンデルワールス力及び双極子-双極子相互作用が主要な分子間相互作用として働く水素結合性アクセプターを持つ物質群⁴⁾

5. カテゴリー II - B に該当する物質の生物濃縮性予測手法の検討

5.1 カテゴリー II - B に該当する物質の生物濃縮性予測の基本的な考え方

カテゴリー II - B に該当する物質は、生物濃縮性予測に関する検討結果 (5.2~5.5 参照) を踏まえ、次の 2 つの手法を用いて生物濃縮性予測を行う。

- [1] logPow を記述子とした予測式から算出される logBCFmax(logBCF の最大値)を用いた定性的な生物濃縮性予測(予測式による生物濃縮性予測の検討結果及び logBCFmax の算出方法などについては、5.2 参照)
- [2] Read-across(類推)による logBCF の定性的または定量的な生物濃縮性予測 (Read-across(類推)による生物濃縮性予測の検討結果及び Read-across(類推)に用いる類縁物質の選択方法などについては、5.3~5.5 参照)

[1] は、カテゴリー II - B に該当する予測対象物質の生物濃縮性を「logBCFmax 以下である」と定性的に予測する手法である(予測手法の詳細については 5.2 参照)。この手法は、logPow<6 のカテゴリー II - B に該当する物質全てに適用可能であるが、厳密な予測ではなく、スクリーニング的に用いる。

[2] は、カテゴリー II - B に該当する予測対象物質の生物濃縮性を類縁物質の生物濃縮性から予測する手法である(予測手法の詳細については 5.3~5.5 参照)。予測対象物質の生物濃縮性は、予測に用いる類縁物質が 1 物質のみの場合は定性的、類縁物質が 2 物質以上ある場合には定量的に予測される(例えば、定性的に予測される場合：「予測対象物質の logBCFmax 以下」、定量的に予測される場合：「予測対象物質の logBCF は[logBCF(予測値)]±[95%信頼限界]」と予測される)。また、予測対象物質の類縁物質が 2 物質以上ある場合には、類縁物質の選択条件によって予測精度が異なる(例えば、分子構造に「官能基」のみを考慮した大まかな条件で作成したサブカテゴリー(5.4 参照)を用いて Read-across (類推)を行う場合には、分子構造に「基本骨格」及び「官能基」を考慮した厳密な条件で作成したサブカテゴリー(5.5 参照)を用いる場合よりも生物濃縮性の予測精度が低いと考えられる)。この方法では、類縁物質が多いほど精度の高い予測結果が得られる可能性が高い。

5.2 カテゴリー II - B に該当する物質の予測式による生物濃縮性予測の検討

ベースデータセット 371 物質(logPow が実測されている物質は 297 物質)におけるカテゴリー II - B に該当する 144 物質(logPow が実測されている物質は 115 物質)の位置付けを確認するために、ベースデータセット及びカテゴリー II - B に該当する物質の logPow と logBCF をプロットした。logPow が実測されているベースデータセット 297 物質及びカテゴリー II - B に該当する 115 物質の logPow(実測値) vs. logBCF プロットを Fig.2 に示す。また、ベースデータセット 371 物質とカテゴリー II - B に該当する 144 物質の logPow(計算値)*3 vs. logBCF プロットの全体図を Fig.3 に示す。カテゴリー I 及びカテゴリー II - A における検討結果から、

分子サイズが大きい物質($D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$)は、生体膜透過における拡散が遅くなることで生物濃縮性が小さくなることが想定されるため、分子サイズが小さい物質($D_{max} < 11 \text{ \AA}$)とは分けて $\log Pow$ と $\log BCF$ のプロットを行った。

カテゴリーII-Bに該当する144物質は、 $-1.96 \leq \log Pow(\text{実測値}) \leq 6.74$ 、 $-3.89 \leq \log Pow(\text{計算値}) \leq 8.99$ 、 $-0.48 \leq \log BCF \leq 4.18$ の範囲に広く分布している。また、カテゴリーII-Bに該当する物質の中で、高濃縮性($BCF \geq 5000$)の物質は144物質中3物質(No.1、2、3)のみで、カテゴリーII-Bに該当する141物質は高濃縮性ではない傾向にあった。高濃縮性($BCF \geq 5000$)であった3物質(No.1、2、3)は、-OH基(ヒドロキシル基)のオルト位にかさ高い置換基を持つ物質で、他の物質が-OH基に接近する際の立体障害が大きく、水素結合性相互作用が期待できない物質であった。

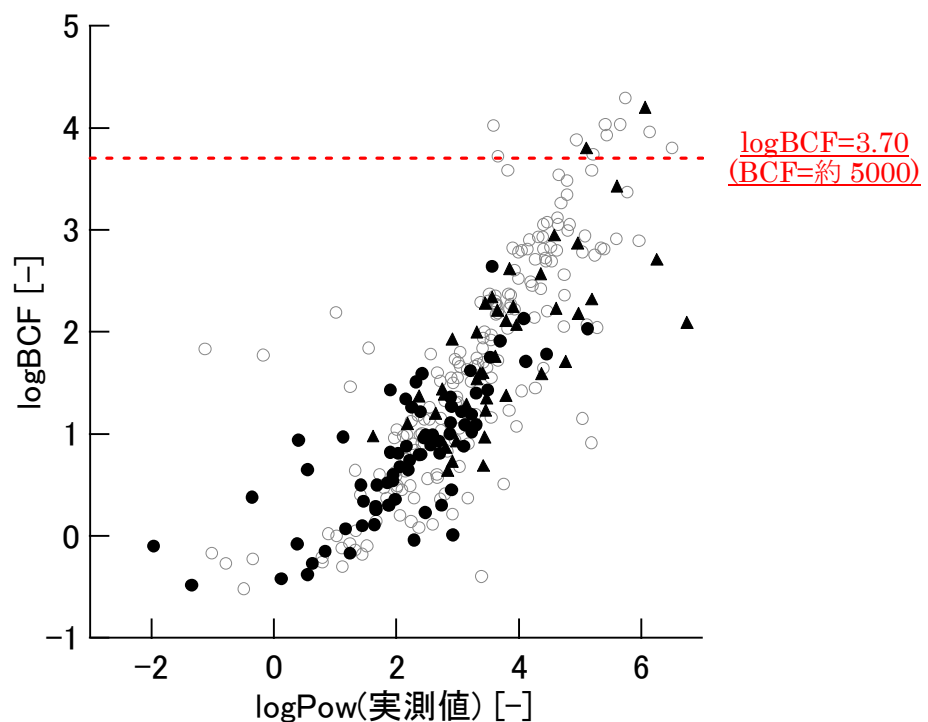


Fig.2 $\log Pow(\text{実測値})$ vs. $\log BCF$ プロット(全 297 物質)

[○:カテゴリーII-Bに該当しない物質(182物質)、●:カテゴリーII-Bに該当する $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の物質(73物質)、▲:カテゴリーII-Bに該当する $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の物質(42物質)]

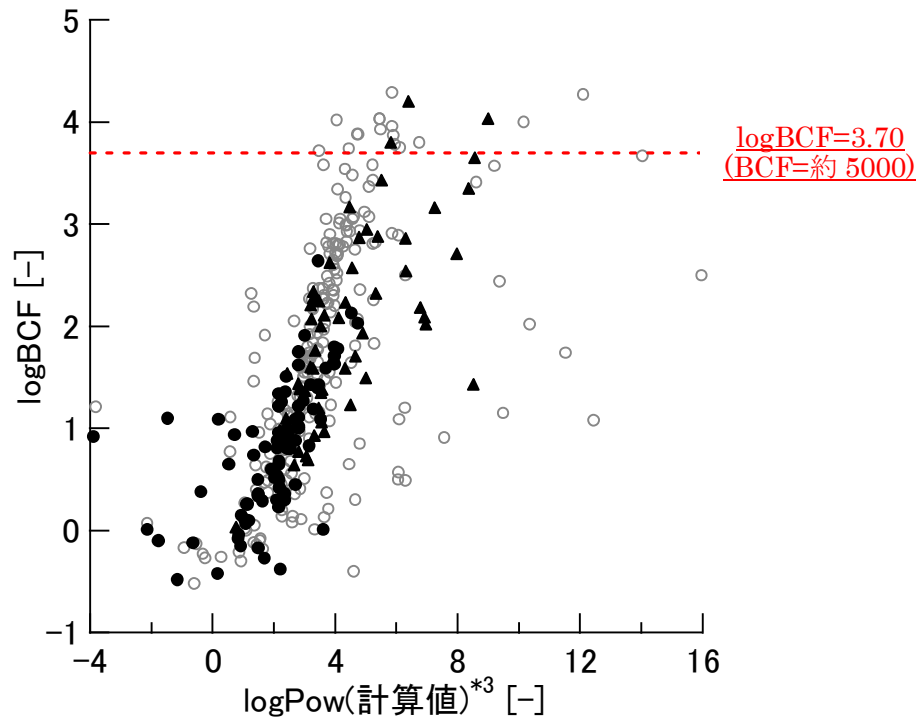


Fig.3 logPow(計算値)^{*3} vs. logBCF プロット(全 371 物質)

[○:カテゴリーⅡ-Bに該当しない物質(227 物質)、●:カテゴリーⅡ-Bに該当する Dmax<11Åの物質(85 物質)、▲:カテゴリーⅡ-Bに該当する Dmax≥11Åの物質(59 物質)]

「3. カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の考え方」で述べたように、カテゴリーⅡ-Bに該当する物質は、化学物質の生体膜透過において水素結合性相互作用が働くため、カテゴリーⅠ及びⅡ-Aに該当する物質の場合とは生物濃縮挙動(logPow と logBCF との関係)が異なる傾向にある(別添1の3. 参照)。また、カテゴリーⅡ-Bに該当するペンタクロロフェノールなどの水中で部分的に解離している物質においては、生物濃縮性にイオン性相互作用が影響する可能性がある。これらのことを踏まえ、カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の生物濃縮性に影響を与えるパラメータについて検討を行った。

カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の生物濃縮性に影響を与えるパラメータについて調査を行い、カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の生物濃縮性に影響を与えられと考えられるファンデルワールス力、双極子-双極子相互作用、水素結合性相互作用、イオン性相互作用(水中で解離している一部のカテゴリーⅡ-Bに該当する物質に働く)を表現する8つのパラメータを選択した(Table3 参照)^{13),14),17),18)}。

データセットにカテゴリーⅡ-Bに該当する144物質の中でlogPow及びpKaが実測されている80物質、目的変数にlogBCF、説明変数に8つのパラメータを用いて、カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の生物濃縮性を対象とした重回帰分析を行った(重回帰分析結果については別添1の4. 参照)。

Table3 重回帰分析に用いた 8 つのパラメータとパラメータに関連すると考えられる
分子間相互作用^{13),14),17),18)}

パラメータ	パラメータに関連すると考えられる分子間相互作用
logPow([1-オクタノール中の化学物質の濃度] /[水中の化学物質の濃度]の対数值)	ファンデルワールスカ
μ^2 (双極子モーメントの2乗) ^{*4}	双極子-双極子相互作用
MR(モル屈折率、分極率 α に比例する値) ^{*5}	
TPSA(Topological Polar Surface Area) ^{*5}	水素結合性相互作用
Hy _{acc} (水素結合アクセプターの数) ^{*5,6}	
Hy _{don} (水素結合ドナーの数) ^{*5,6}	
pH-pKa (水中における化学物質の解離度に関 連する値) ^{*7,8}	イオン性相互作用
logD(LogPow に酸解離定数(pKa)を加味した値)	ファンデルワールスカ及びイオン性相互作用

重回帰分析の結果から、カテゴリー II-B に該当する物質の生物濃縮性に関連すると考えられる 8 つのパラメータの中で、logPow(実測値)または logD のみが全ての場合で有意なパラメータとして選択され、今回検討を行った 8 つのパラメータからは水素結合性相互作用及びイオン性相互作用を表現するパラメータを見出すことはできなかった。今回の重回帰分析において、水素結合性相互作用及びイオン性相互作用を表現するパラメータが有意に選択されなかった理由の一つとして、logPow が小さい物質が多く、生体内に取り込まれる物質の量が少ないことから、生物濃縮性における水素結合性相互作用やイオン性相互作用の影響が大きい物質と小さい物質の差が見えにくかったことが考えられる。また、今回の検討に用いた水素結合性相互作用を表現するパラメータである TPSA、Hy_{acc}、Hy_{don} には立体効果や置換基効果が考慮されていないため、水素結合性相互作用を十分に記述できていない可能性が考えられる。

また、有意に選択されたパラメータである logPow(実測値)と logBCF、logD と logBCF の相関はそれぞれ $R^2=0.659$ 、 0.446 と弱く、logPow(実測値)または logD を用いた logBCF の予測式の予測精度は低いと考えられることから、カテゴリー II-B に該当する物質の生物濃縮性を対象とした予測式の作成は行わなかった。

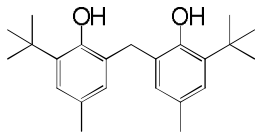
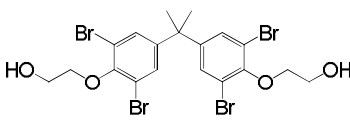
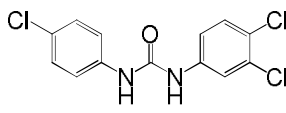
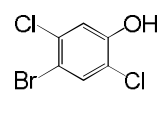
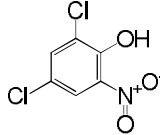
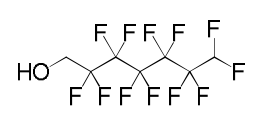
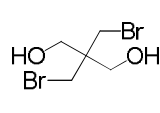
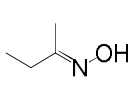
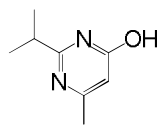
カテゴリー II-B に該当する物質は、生体膜中に取り込まれる際の水素結合の開裂に伴うエネルギーの損失や生体膜分子との水素結合性相互作用による拡散速度の低下、アルコール、フェノールなどの物質の肝臓や腸管における代謝の第 1 相反応及び第 2 相反応による排泄などの理由により、理論上、同程度の logPow を持つカテゴリー I 及び II-A に該当する物質よりも生物濃縮性が低い傾向にあると考えられる。このことから、カテゴリー II-B に該当する物質の生物濃縮性は、「カテゴリー I 及び II-A の logPow を記述子とした logBCF の予測式(1)及び(2)^{3),4)}(以下、予測式(1)、予測式(2))から算出される logBCF(予測値)の 95%信頼限界の上限値(以下、logBCFmax)より低い値である」と定性的に予測を行うことが可能と考えた(logBCFmax の算出方法は、5.1.1 及び 5.1.2 参照)。

$\log\text{BCF} = 1.05\log\text{Pow}(\text{実測値}) - 1.71(R^2 = 0.905, Q^2 = 0.897, n = 48) \cdots \text{予測式(1)}$ $\log\text{BCF} = 1.03\log\text{Pow}(\text{計算値}) - 1.48(R^2 = 0.890, Q^2 = 0.878, n = 54) \cdots \text{予測式(2)}$ <p>* R^2、Q^2、n は、それぞれ予測式(1)、予測式(2)における決定係数、クロスバリデーション(leave-one-out 法)後の決定係数、予測式の作成に用いたデータ数である。</p>
--

ただし、カテゴリー II-B に該当する物質の中には、実測値または予測値のどちらかの誤差が要因で、logPow(実測値)と logPow(計算値)の差が 1 よりも大きい物質もある(Table4 参照)。

そのため、logPow(計算値)及び予測式(2)を用いて、カテゴリーII-Bに該当する物質の生物濃縮性を精度良く予測したい場合には、類縁物質を用いてlogPowの予測精度を検討することが必要である。

Table4 カテゴリーII-Bに該当するlogPow(実測値)とlogPow(計算値)の差が1よりも大きい物質(9物質)

No.	分子構造	logBCF (実測値) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値)*3 [-]	logPow(実測値)と logPow(計算値) の差 [-]
13		2.69	6.25	7.97	-1.72
24		2.16	4.97	6.78	-1.81
34		1.91	2.91	4.90	-1.99
44		1.59	2.42	3.69	-1.27
51		1.43	1.90	3.20	-1.3
67		1.21	3.46	4.50	-1.04
135		-0.04	2.29	0.85	1.44
141		-0.27	0.63	1.69	-1.06
142		-0.38	0.55	2.21	-1.66

カテゴリーII-Bに該当する144物質のlogPowとDmaxによる分類をTable5に示す。また、カテゴリーII-Bに該当する物質でlogPowが実測されている115物質のlogPow(実測値)とlogBCF及び予測式(1)、logBCFmaxの関係を図4aに示す。カテゴリーII-Bに該当する144物質のlogPow(計算値)とlogBCF及び予測式(2)、logBCFmaxとの関係を図4bに示す。

Table5 カテゴリーII-Bに該当する144物質のlogPowとDmaxによる分類結果

物質群	logPowが実測されている物質 (115物質)		logPowが計算可能な物質 (144物質)	
	Dmax<11Å	Dmax≥11Å	Dmax<11Å	Dmax≥11Å
カテゴリーII-Bに該当する物質(144物質)	73物質	42物質	85物質	59物質

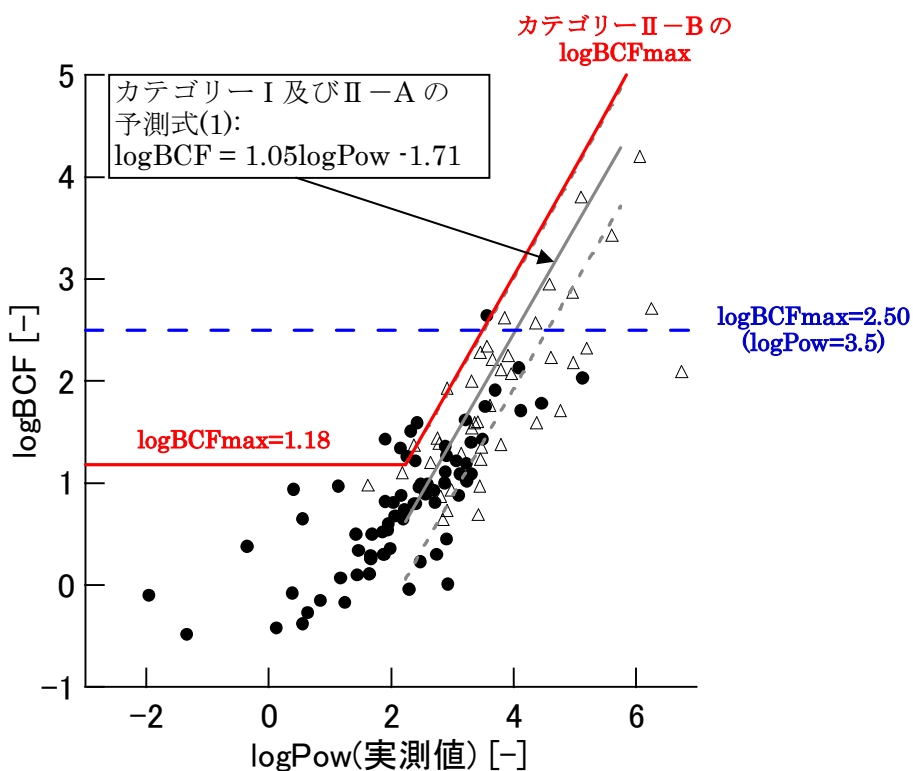


Fig.4a logPow(実測値) vs. logBCFプロット(カテゴリーII-Bに該当する115物質)

[●:カテゴリーII-Bに該当するDmax<11Åの物質(73物質)、△:カテゴリーII-Bに該当するDmax≥11Åの物質(42物質)、--:予測式(1)の95%信頼限界]

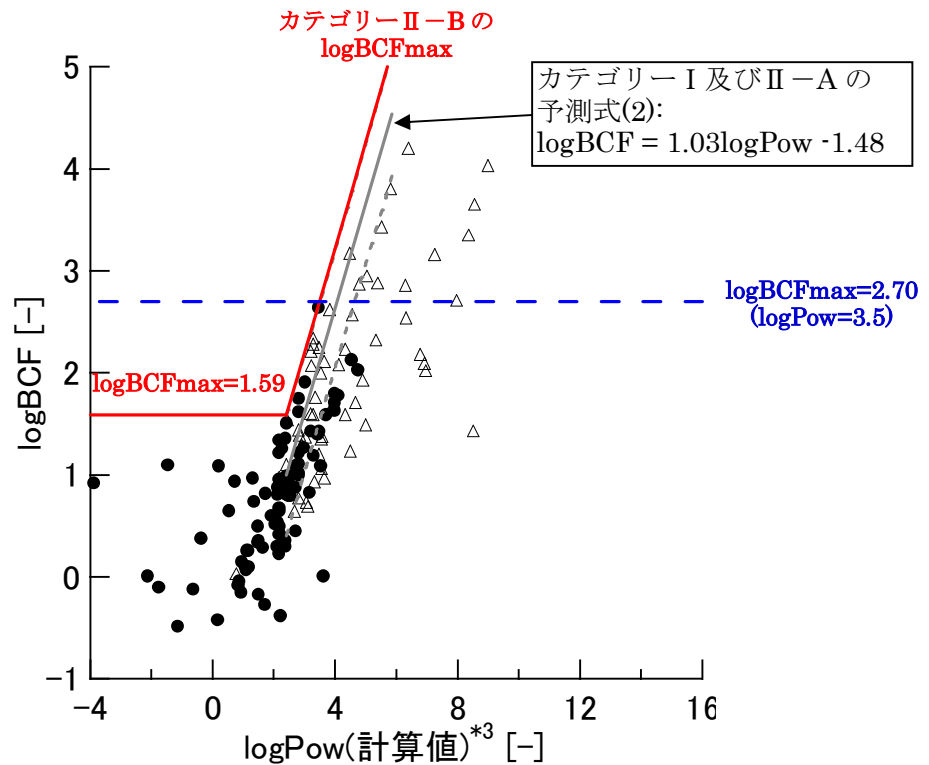


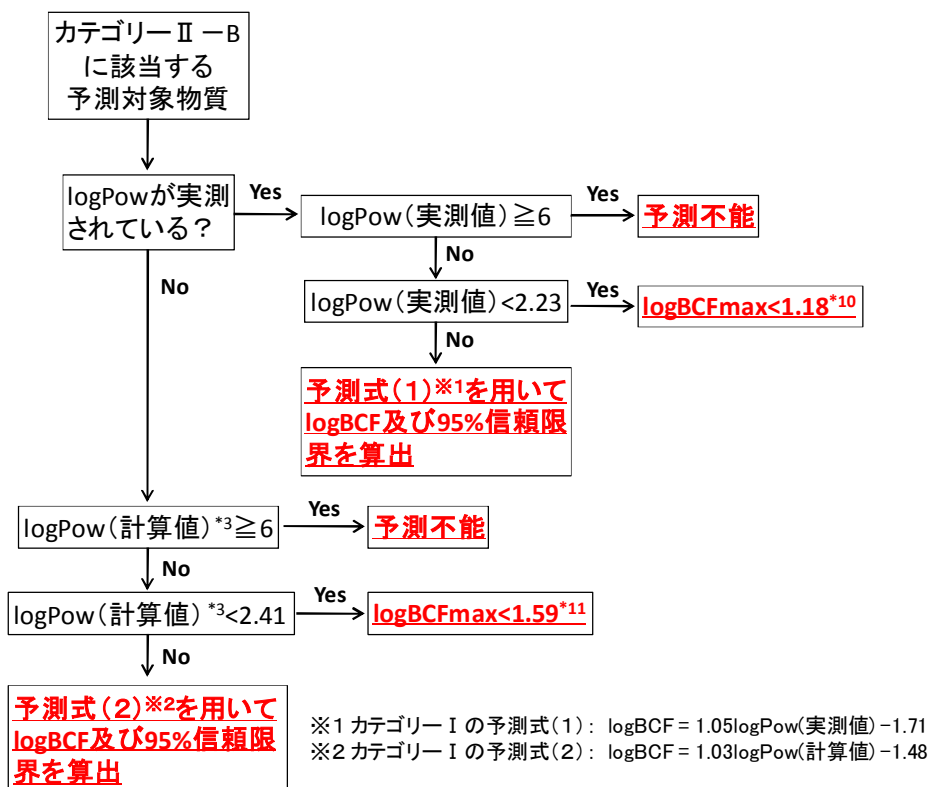
Fig.4b logPow(実測値) vs. logBCF プロット(カテゴリー II-B に該当する 144 物質)

[●:カテゴリー II-B に該当する $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の物質(85 物質)、△:カテゴリー II-B に該当する $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の物質(59 物質) - -: 予測式(2)の 95%信頼限界]

カテゴリー II-B に該当する $\log Pow \geq 6$ の物質は、予測式(1)及び(2)の適用範囲外であることから予測不能と考えられる(予測式(1)及び(2)の適用範囲外である $\log Pow \geq 6$ の物質の $\log Pow$ と生物濃縮性との関係については、5.3.1 の B-2 参照)。また、カテゴリー II-B に該当する分子サイズが大きい($D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$)物質は、濃縮メカニズムの観点から、生体膜透過における拡散が遅くなると考えられる。そのため、カテゴリー II-B に該当する分子サイズが大きい($D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$)物質の $\log BCF$ は、 $\log Pow$ と $\log BCF$ の相関から期待される生物濃縮性よりも低濃縮になる傾向にある(物質の生物濃縮性と分子サイズの関係については、5.3.1 の B-1 参照)。このことから、予測式(1)及び(2)の適用範囲外である $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のカテゴリー II-B に該当する物質においても、「予測式(1)または予測式(2)から算出される $\log BCF$ (予測値)の 95%信頼限界の上限値(以下、 $\log BCF_{max}$)より低い値である」と定性的に予測をすることができると判断した。

予測式(1)または予測式(2)の作成に用いたデータセットにおける $\log Pow$ の下限値が、 $\log Pow(\text{実測値})=2.23$ 、 $\log Pow(\text{計算値})=2.41$ であることから、カテゴリー II-B に該当する $\log Pow(\text{実測値}) < 2.23$ の物質は $\log BCF_{max} < 1.18$ (この 1.18 は、予測式(1)に $\log Pow=2.23$ を代入した場合の $\log BCF$ の 95%信頼限界の上限値)、 $\log Pow(\text{計算値}) < 2.41$ の物質は $\log BCF_{max} < 1.59$ (この 1.59 は、予測式(2)に $\log Pow=2.41$ を代入した場合の $\log BCF$ の 95%信頼限界の上限値)と定性的に予測を行う。(詳細は Scheme2 参照)また、現在の化審法のクライテリアで「 $\log Pow(\text{実測値})$ が 3.5 未満の物質は、高濃縮性ではない」と判断していることを踏まえ、 $\log Pow(\text{実測値})=3.5$ または $\log Pow(\text{計算値})=3.5$ の場合の $\log BCF_{max}$ の値($\log Pow(\text{実$

測値)=3.5 の場合 : logBCFmax=2.50、logPow(計算値)=3.5 の場合 : logBCFmax=2.70)を Fig.4a、4b に示す。



Scheme2 カテゴリーII-Bに該当する物質の予測式(1)または予測式(2)を用いた

生物濃縮性の定性的評価手順

- * 3 logPow(計算値):KOWWIN ver.1.67 を用いて算出される値
- * 4 Dmax: 分子を球に入れたとき最小となる直径の値
Database Manager ver.1.3 を用いて算出
計算条件: Conversion mode: Automated OASIS
Conformer generation: Rapid
Calculation method: AM1
- * 5 MOE2009.10(Chemical Computing Group Inc.)を用いて算出。
- * 6 Hy_acc と Hy_don は 2 つで 1 パラメータとして解析に用いた。
- * 7 カテゴリーII-Bに該当する144物質の中で、濃縮度試験におけるpHが実測されている59物質の平均値(7.77)を用いた。
- * 8 pKa が実測されている場合には、実測値を使用。pKa が実測されていない場合には、ACD pKa DB ver.12.0 を用いて算出。
- * 9 濃縮度試験における魚体表面への化学物質の吸着、餌に吸着して腸等に残留している化学物質のような濃縮とは異なる現象によって、logBCF の実測精度が低くなることなど。
- * 10 予測式(1)に logPow=2.23 を代入した場合の logBCF の 95%信頼限界の上限值
- * 11 予測式(2)に logPow=2.41 を代入した場合の logBCF の 95%信頼限界の上限值

5.2.1 logPow(実測値)と予測式(1)を用いた logBCFmax の算出方法^{3),4)}

予測対象物質の logPow(実測値)を予測式(1)に代入し、logBCF(予測値)を算出する。

$$\log BCF = 1.05 \log Pow(\text{実測値}) - 1.71 (R^2 = 0.905, Q^2 = 0.897, n = 48) \dots \text{予測式(1)}$$

logPow(実測値)=x₁ とおくと、予測対象物質の logBCF(予測値)の 95%信頼限界は次式(3)より算出される。

$$[95\% \text{信頼限界}] = \sqrt{Ve \left\{ 1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_1 - \bar{x}_1)^2}{Sxx} \right\}} \times t(\text{自由度}, 0.05) \quad (3)$$

ここで、 V_e (予測式(1)の誤差分散)=0.067、 n (データ数)=48、 S_{xx} (トレーニングセットの x_1 の標準偏差の平方和)=26.62、 \bar{x}_1 (x_1 の平均値)=3.83、 t 分布表より $t(\alpha=0.05$ 、自由度 47、両側)のとき $t=2.012$ である。

予測式(1)及び式(3)から算出された「logBCF(予測値)」及び「95%信頼限界」から、logBCFmax は次のとおり算出される。

$$\log BCF \max = \log BCF(\text{予測値}) + [95\% \text{信頼限界}]$$

5.2.2 logPow(計算値)と予測式(2)を用いた logBCFmax の算出方法^{3),4)}

予測対象物質の logPow(計算値)^{*3} を予測式(2)に代入し、logBCF(予測値)を算出する。

$$\log BCF = 1.03 \log \text{Pow}(\text{計算値}) - 1.48(R^2 = 0.890, Q^2 = 0.878, n = 54) \dots \text{予測式(2)}$$

logPow(予測値)= x_2 とおくと、logBCF の 95%信頼限界は次式(4)より算出される。

$$[95\% \text{信頼限界}] = \sqrt{V_e \left\{ 1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_2 - \bar{x}_2)^2}{S_{xx}} \right\}} \times t(\text{自由度}, 0.05) \quad (4)$$

ここで、 V_e (予測式(2)の誤差分散)=0.081、 n (データ数)=54、 S_{xx} (トレーニングセットの x_2 の標準偏差の平方和)=32.024、 \bar{x}_2 (x_2 の平均値)=3.77、 t 分布表より ($\alpha=0.05$ 、自由度 53、両側)のとき $t=2.006$ である。

予測式(2)及び式(4)から算出された「logBCF(予測値)」及び「95%信頼限界」から、logBCFmax は次のとおり算出される。

$$\log BCF \max = \log BCF(\text{予測値}) + [95\% \text{信頼限界}]$$

5.3 カテゴリー II-B に該当する物質の Read-across(類推)による生物濃縮性予測の検討

Read-across は、未試験物質の有害性等を同じカテゴリー内に属する有害性等が既知の類縁物質(分子構造、物理化学的性状等が類似な物質)から予測する方法で、OECD (Q)SAR Application Toolbox¹⁹⁾で提唱されている予測手法である。カテゴリー II-B に該当する物質においては、5.3.1~5.3.4 に示す類縁物質の選択方法及び予測手順を用いて、Read-across を用いた生物濃縮性予測を行う。

5.3.1 カテゴリー II-B に該当する物質の Read-across(類推)に用いる類縁物質の選択方法

カテゴリー II-B に該当する物質の Read-across(類推)に用いる類縁物質は、次に述べる(A) 予測対象物質と類縁物質の分子構造の類似性、(B) 予測対象物質と類縁物質の物理化学的性状の類似性を踏まえ、基本的には「基本骨格」、「官能基」、「Dmax」、「logPow」、「水中におけるイオン存在割合」の 5 つの条件を用いて選択する。ただし、個々の物質の生物濃縮性を定性的に論じる上で有用な物理化学的性状値がある場合には、その他の物理化学的性状値を用いる場合もある。

(A) 予測対象物質と類縁物質の分子構造の類似性

化学物質の基本となる分子構造(基本骨格)及び置換している官能基が異なる場合には、分子サイズや水素結合性の官能基における置換基効果(立体的効果及び電子的効果)の違いによっ

て、化学物質の生体膜透過における拡散速度、生体膜分子及び生体内分子との分子間相互作用、生体内での代謝反応が異なることが予想される。このことから、カテゴリⅡ-Bに該当する物質の Read-across を用いた生物濃縮性予測を行う際には、「基本骨格」及び「官能基」の2つを考慮して類縁物質の選択を行う。

(B) 予測対象物質と類縁物質の物理化学的性状の類似性

化学物質の生物濃縮性と物理化学的性状(分子サイズ及び logPow など)との関連性については、様々な報告例がある。

B-1. 化学物質の生物濃縮性と分子サイズ(分子量、Dmax など)との関係について

化学物質の分子サイズが大きくなると、化学物質の魚類における生物濃縮性が低下する傾向にあることはよく知られている。REACH の RIPs(REACH Implementation Projects)では、 $D_{max} > 17 \text{ \AA}$ かつ分子量が 1100 を超える物質は「B ではない(BCF が 2,000 を超える可能性は低い)」、 $D_{max} > 17 \text{ \AA}$ かつ分子量が 700 を超える物質は「vB ではない(BCF が 5,000 を超える可能性は低い)」と見なされる場合もある²⁰⁾。

化学物質の魚類における生物濃縮性と分子サイズに関する他の報告例として、Dimitrov らは 694 物質の魚類における logBCF の結果から、 $D_{max} > 14.7 \text{ \AA}$ の物質の生物濃縮性は全て $\log BCF < 3.5$ にあることを報告している²¹⁾。また、Sakuratani らは分子量 > 550 かつ $D_{max} > 29 \text{ \AA}$ かつ D_{eff} (分子を円柱に入れた場合の最小となる円柱の直径) $> 14 \text{ \AA}$ の物質の生物濃縮性は、全て $\log BCF < 3.0$ であることを報告している²²⁾。

当機構では、カテゴリⅠ及びⅡ-Aに該当する物質の生物濃縮性の検討結果から、分子サイズが大きい物質($D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$)は生体膜透過における拡散が遅くなるため、生物濃縮性が低下する傾向にあると結論付けた。このことから、カテゴリⅡ-Bに該当する物質の生物濃縮性においても同様に、 $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の物質の生物濃縮性は低下する傾向にあると考えられるため、カテゴリⅡ-Bに該当する物質の Read-across(類推)を用いた生物濃縮性予測を行う際には、 $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の物質と $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の物質を区別して類縁物質の選択を行う。

B-2. 化学物質の生物濃縮性と logPow との関係について

化学物質の生物濃縮性と疎水性を表す代表的なパラメータである logPow との間には、相関性があることが一般的に知られている^{11),12)}。また、Chassells らの研究から、超疎水性化合物(super-hydrophobic : $\log Pow > 6$ の物質)は、logPow の増加に伴って脂質溶解性が低下し、logPow と logBCF の相関性から期待されるほどの生物濃縮性を持たないことが報告されている²³⁾。

本報告書におけるカテゴリⅡ-Bに該当する物質の生物濃縮性に影響を与えるパラメータの重回帰分析結果(別添1の4.参照)から、全ての場合において logPow と logBCF との間に有意な相関があるとの結果が得られた。このことから、カテゴリⅡ-Bに該当する物質の Read-across(類推)を用いた生物濃縮性予測を行う際には、logPow(実測値)または logPow(計算値)^{*3}が一定の範囲内にある物質を類縁物質として選択する。基本的に logPow の範囲が[予測対象物質の logPow^{*3}] ± 0.5 にある物質を類縁物質として選択する。ただし、logPow の範囲が[予測対象物質の logPow] ± 0.5 にある物質の数が少ない場合には、必要とされる予測精度に応

じて、[予測対象物質の logPow]>0.5 にある物質を類縁物質として選択する場合もある。

カテゴリ II-B に該当する物質の中には、logPow(実測値)と logPow(計算値)の差が 1 より大きい物質もある(Table4 参照)ため、logPow(計算値)を適用範囲に用いて類縁物質の選択を行う場合には、類縁物質の logPow の予測精度を検討することが必要である。

B-3. 化学物質の生物濃縮性と水中におけるイオン存在割合との関係について

カテゴリ II-B に該当する物質の生物濃縮性に影響を与えるその他の因子として、Saarikoski らはメダカにおける化学物質の生物濃縮性と水中の pH との関係について検討を行っており、カテゴリ II-B に該当するペンタクロロフェノール、2,4,6-トリクロロフェノールなどの水中で解離する物質は、 $\text{pH}-\text{pKa}$ が-1(水中でのイオンとしての存在割合が 10%)を超えると化学物質の生体への取り込み速度が減少することを報告している²⁴⁾。また、生体膜の構成成分にリン脂質が含まれていることを考えると、化学物質の生体膜透過において、リン脂質のアニオン部位と化学物質のアニオン部位またはカチオン部位との間にイオン性相互作用が働き、解離性の物質は非解離性の物質とは異なる生物濃縮挙動を示すことが想定される。これらのことを踏まえ、カテゴリ II-B に該当する物質の Read-across を用いた生物濃縮性予測を行う際には、イオン存在割合が 10%未満の物質とイオン存在割合が 10%以上の物質を区別して類縁物質の選択を行う。水中におけるイオン存在割合を算出する際には、 $\text{pH}=7.77^*7$ 、 pKa には pKa (実測値)または pKa (計算値)^{*8}を用いる。

B-4. 化学物質の生物濃縮性とその他のパラメータとの関係について

化学物質の生物濃縮性と B-1~B-3 以外の物理化学的性状との関係として、Matsuo らは有機性値(Σo)及び無機性値(Σi)^{*12} と生物濃縮性との関係について報告している²⁵⁾⁻²⁷⁾。また、Table3 に示した μ^2 、MR、TPSA、Hy_acc、Hy_don などの物理化学的性状のパラメータは、カテゴリ II-B に該当する物質の生物濃縮性を定量的に予測する際には有意なパラメータとして選択されなかったが、構造等の類似する類縁物質間に限定すれば生物濃縮性の大小関係を定性的或いは定量的に記述する上で有用となる可能性もある。これらのことから、カテゴリ II-B に該当する物質の Read-across を用いた生物濃縮性の予測を行う際には、構造類似性や logPo/w をはじめとした上記の各因子に加えて、 Σi 、 Σo 、 μ^2 などの極性相互作用に係るこれらの物理化学的性状値を類似性の判定に補足的に用いる場合もある。

* 3 logPow(計算値): KOWWIN ver.1.67 を用いて算出される値

* 4 Dmax: 分子を球に入れたとき最小となる直径の値

Database Manager ver.1.3 を用いて算出

計算条件: Conversion mode: Automated OASIS

Conformer generation: Rapid

Calculation method: AM1

* 7 カテゴリ II-B に該当する 144 物質の中で、濃縮度試験における pH が実測されている 59 物質の試験水の平均値(7.77)を用いた。

* 8 pKa が実測されている場合には、実測値を使用。pKa が実測されていない場合には、ACD pKa DB ver.12.0 を用いて算出。

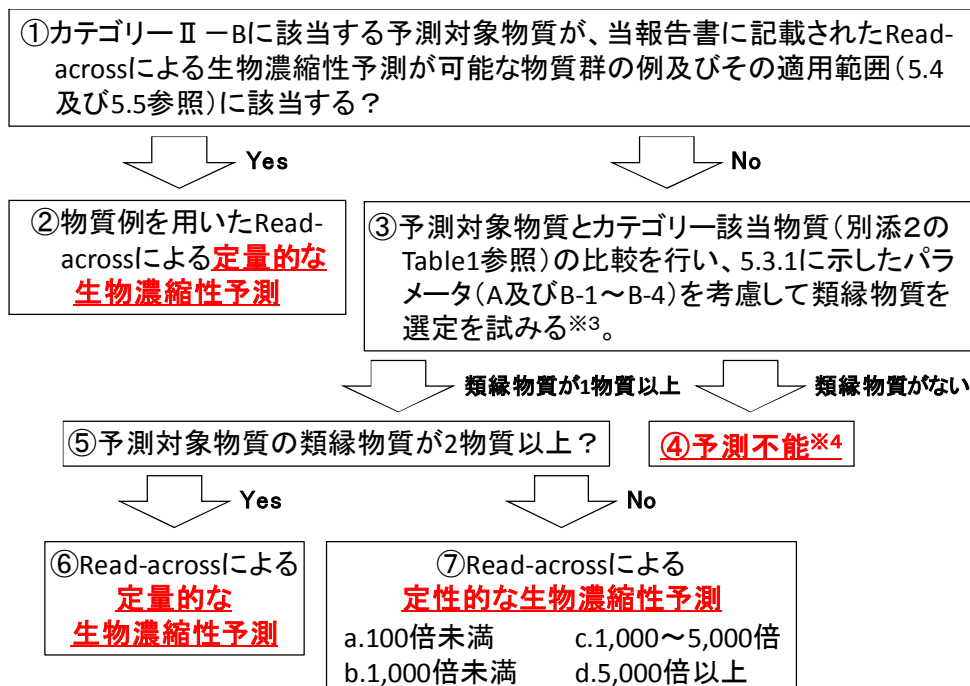
* 12 1930 年に藤田 穆らが提唱した物性値。有機性値(Σo)は化学物質の共有結合性を表す値で、無機性値(Σi)は化学物質のイオン結合性を表す値である。

5.3.2 カテゴリーⅡ-Bに該当する物質のRead-across(類推)に用いた生物濃縮性予測の手順

カテゴリーⅡ-Bに該当する未試験物質(以下、予測対象物質)のカテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測を行う場合には、次の手順で予測を行う(主な予測手順はScheme3参照)。

- ① 予測対象物質が、カテゴリーⅡ-Bの定義(4.参照)に該当する144物質を対象とした本報告書における解析結果に基づいて定義されたRead-across(類推)による生物濃縮性予測が可能な物質群の例及びその適用範囲(物質群はTable6参照、詳細は5.4、5.5参照)に該当するかどうか確認する。
- ② ①に該当する場合は、該当する物質群から類縁物質を選択し、「物質例を用いたRead-acrossによる予測対象物質の定量的な生物濃縮性予測」を行う。
- ③ ①に該当しない場合には、予測対象物質とカテゴリー該当物質(別添2のTable1-1参照)の比較を行い、類縁物質の選定を試みる。(類縁物質の選定条件は5.3.1参照。前述のAおよびB-1からB-3に加えて、可能であればB-4のパラメータも考慮して類縁物質を選定する。)類縁物質の選定は、評価者の判断に依存するため、第三者が選択した類縁物質の妥当性やRead-acrossの予測精度について判断できるように、類縁物質の選択条件を明示することが必要である(※)。
- ④ 予測対象物質とカテゴリー該当物質の比較を行い、「類縁物質がない」と判断された場合には、Read-acrossによる予測対象物質の生物濃縮性予測は「予測不能」とする。
- ⑤ 予測対象物質とカテゴリー該当物質の比較を行い、「類縁物質が1物質以上ある」と判断された場合、類縁物質が2物質以上ある場合(⑥)と類縁物質が1物質の場合(⑦)に場合分けを行い、Read-acrossによる予測対象物質の生物濃縮性予測を行う。
- ⑥ 予測対象物質とカテゴリー該当物質の比較を行い、類縁物質が2物質以上ある場合には、選択した類縁物質を用いた「Read-acrossによる予測対象物質の定量的な生物濃縮性予測」を行う。
- ⑦ 予測対象物質とカテゴリー該当物質の比較を行い、類縁物質が1物質の場合には、選択した類縁物質を用いた「Read-acrossによる予測対象物質の定性的な生物濃縮性予測」を行う。

※選択した類縁物質を用いてRead-across(類推)による生物濃縮性予測を行う際には、Read-across(類推)が適用可能な物質の範囲を明確にするため、1. 基本骨格(分子構造)、2. 置換基、3. 各パラメータの値の適用範囲を明記する必要がある。



※3 第三者が確認できるように類縁物質の選択条件の記載が必要である。また、必要とされる予測精度に応じて、[予測対象物質のlogPow]>0.5にある物質を類縁物質として選択する場合もある。
 ※4 類縁物質の選択条件を変更すれば、大まかな予測が可能な場合もある。

Scheme3 カテゴリーⅡ-Bに該当する物質のRead-acrossを用いた生物濃縮性の予測手順

Table6 当報告書に記載されたRead-acrossによる生物濃縮性予測が可能な物質群の例

	Read-acrossによる生物濃縮性予測が可能な物質群 (データセットに用いた144物質における該当物質数)	適用範囲の詳細について
(ア)	酸性物質(66物質)	p.22 参照
(イ)	塩基性物質(48物質)	
(ウ)	中性物質(33物質)	
(エ)	単環フェノール1(16物質)	p.29 参照
(オ)	単環フェノール2(6物質)	p.31 参照
(カ)	単環フェノール3(17物質)	p.36 参照
(キ)	ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つフェノール(7物質)	p.33 参照
(ク)	単環アルキルアニリン(17物質)	p.43 参照
(ケ)	ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つアミン(5物質)	p.46 参照
(コ)	トリアジン骨格を持つアミン(2物質)	p.47 参照
(サ)	アントラキノン骨格を持つアミン(2物質)	p.47 参照
(シ)	鎖状脂肪族アルコール(8物質)	p.50 参照
(ス)	芳香族アルコール(3物質)	p.53 参照

※分子構造に「官能基」のみを考慮したサブカテゴリー(ア)~(ウ)を用いてRead-across(類推)を行う場合には、分子構造に「基本骨格」及び「官能基」を考慮したサブカテゴリー(エ)~(ス)を用いる場合よりも生物濃縮性の予測精度が低いと考えられる。

5.3.3 Read-across によるカテゴリ II-B に該当する物質の生物濃縮性の定量的な予測方法

Read-across を用いた生物濃縮性の定量的な予測では、類縁物質の生物濃縮性(logBCF)の平均値を算出し、予測対象物質の生物濃縮性を判断する。このことから、5.3.2 に示した「Read-across に用いた生物濃縮性予測の手順」に従い、②物質例を用いた Read-across による予測対象物質の定量的な生物濃縮性予測、⑥選択した類縁物質を用いた「Read-across による予測対象物質の定量的な生物濃縮性予測」を行うと判断された場合には、(5)式を用いて類縁物質の生物濃縮性(logBCF)の平均値及び 95%信頼限界を算出し、予測対象物質の生物濃縮性の定量的な予測を行う。(予測例は 6. 参照)

$$(\text{予測対象物質の logBCF}) = (\text{類縁物質の logBCF の平均値}) \pm (95\% \text{信頼限界} \times) \cdot (5)$$

$$\text{※}(95\% \text{信頼限界}) = (\text{類縁物質の logBCF の標準誤差}) \times t \text{ 値} (\text{自由度: [物質数}-1], \text{確率: } 5\%)$$

ただし、Read-across による予測対象物質の生物濃縮性予測の予測精度及び信頼性は、Read-across に用いた類縁物質に依存すると考えられるため、予測結果には「類縁物質の選択条件」及び「類縁物質の logBCF 及び物理化学的性状などの情報」を明示することが必要である。

5.3.4 Read-across によるカテゴリ II-B に該当する物質の生物濃縮性の定性的な予測方法

5.3.2 に示した Read-across に用いた生物濃縮性予測の手順に従い、⑦Read-across による予測対象物質の定性的な生物濃縮性予測を行うと判断された場合には、Read-across による定性的な予測(a.100 倍未満、b.1,000 倍未満、c.1,000~5,000 倍、d.5,000 倍以上の 4 クラスに分類)を行う。Read-across による定性的な予測の例を Table7 に示す。

Table7 カテゴリ II-B に該当する未試験物質の Read-across を用いた定性的な生物濃縮性予測例

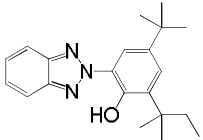
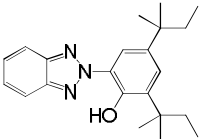
	分子構造	logBCF [-]	logPow(実測値) [-]	logPow(計算値)*3 [-]	Dmax*4 [Å]	水中(pH=7.77)での イオン存在割合 [-]
予測対象物質		-	-	6.75	15.0	6.6
類縁物質		3.14	-	7.25	15.0	6.6

Table7 に示したカテゴリ II-B に該当する予測対象物質は類縁物質のベンゼン環の 4 位の置換基の炭素数が 1 つ短い分子構造を持つ物質で、基本骨格及び官能基が同じで類似性が高い類縁物質と考えられる。また、予測対象物質と類縁物質の物理化学的性状は、両物質ともに Dmax ≥ 11 Å、水中でのイオン存在割合は 6.6%かつ logPow(計算値)の値の差は 0.5 で、類似な物理化学的性状を持つと考えられる。以上のことから、予測対象物質は類縁物質と類似性が高く、予測対象物質の生物濃縮性は、類縁物質の生物濃縮性(logBCF=3.14)と同程度と考えられるため、未試験物質の生物濃縮性は 1,000~5,000 倍であると判断する。

5.4 Read-across(類推)による生物濃縮性予測が可能な物質群の例及びその適用範囲について

カテゴリーII-Bに該当する物質の定義(4. 参照)に従い、今回の検討に用いたベースデータセット 371 物質の中でカテゴリーII-Bに該当する 144 物質を酸性物質 66 物質(別添2のTable1-2参照)、塩基性物質 48 物質(別添2のTable1-3参照)、両性物質 1 物質(別添2のTable1-1のNo.94)中性物質 33 物質(別添2のTable1-4参照)に分類した(複数の官能基を持ち、重複している物質がある(4 物質))。各物質群における logPow が実測されている物質の数、logPow 及び Dmax=11Åを用いた細分類の結果を Table8 に示す。

Table8 酸性物質 66 物質、塩基性物質 48 物質、中性物質 33 物質における logPow が実測されている物質の数と Dmax=11Åを用いた細分類の結果

物質群	logPow が実測されている物質 (117 物質)		logPow が計算可能な 物質(147 物質)		
		Dmax<11Å	Dmax≥11Å	Dmax<11Å	Dmax≥11Å
酸性物質(66 物質)	54 物質	36 物質	18 物質	39 物質	27 物質
塩基性物質(48 物質)	40 物質	24 物質	16 物質	29 物質	19 物質
中性物質(33 物質)	23 物質	13 物質	10 物質	18 物質	15 物質

酸性物質 66 物質(logPow が実測されている物質は 54 物質)、塩基性物質 48 物質(logPow が実測されている物質は 40 物質)、中性物質 33 物質(logPow が実測されている物質は 23 物質)の logPow と logBCF のプロットを Fig.5a~Fig.5f に示す。また、各物質群の Read-across を用いた生物濃縮性予測の Dmax、イオン存在割合、logPow の適用範囲を Table9 に示す。

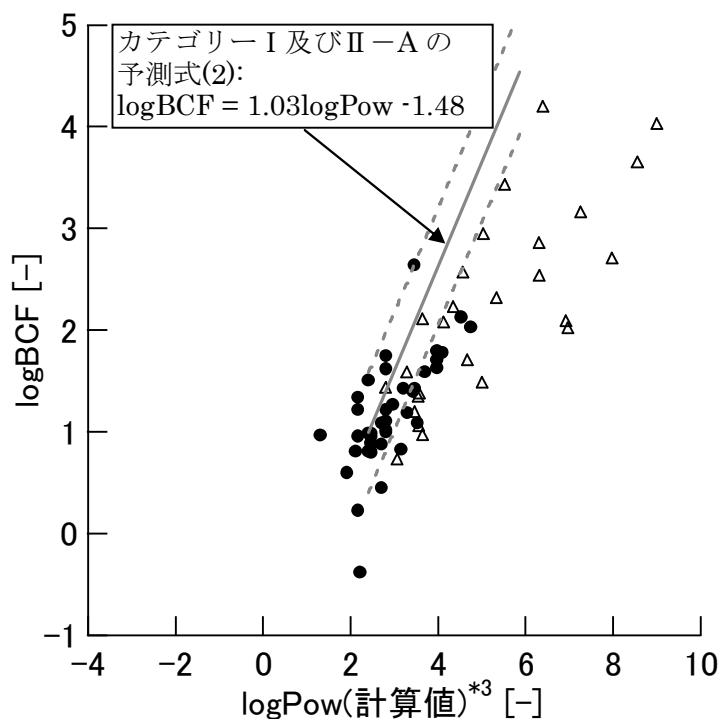


Fig.5a logPow(計算値) vs. logBCF プロット(酸性物質 66 物質)
 [●:Dmax<11Åのフェノール(39 物質)、△:Dmax≥11Åのフェノール(27 物質)、
 - -:予測式(2)の95%信頼限界]

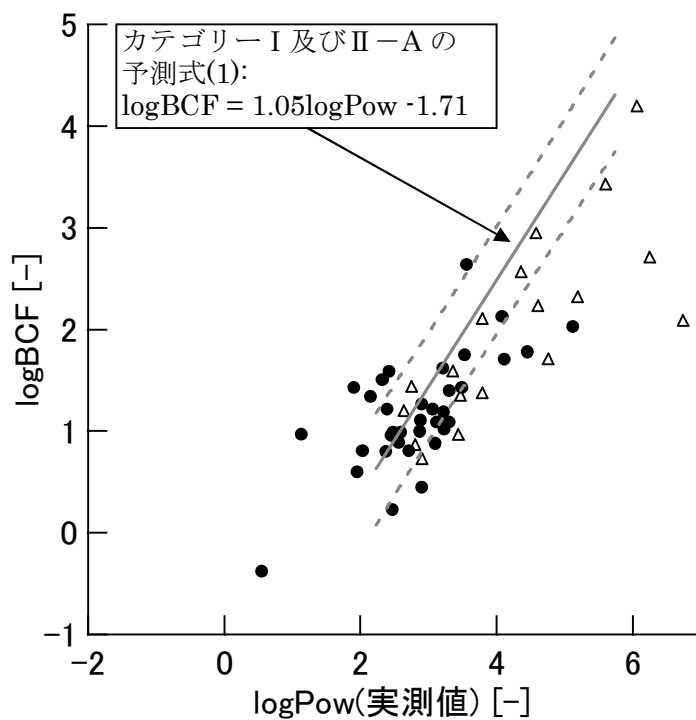


Fig.5b $\log Pow$ (実測値) vs. $\log BCF$ プロット(酸性物質 54 物質)
 [●: $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール(36 物質)、△: $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール(18 物質)、
 ---: 予測式(1)の 95%信頼限界]

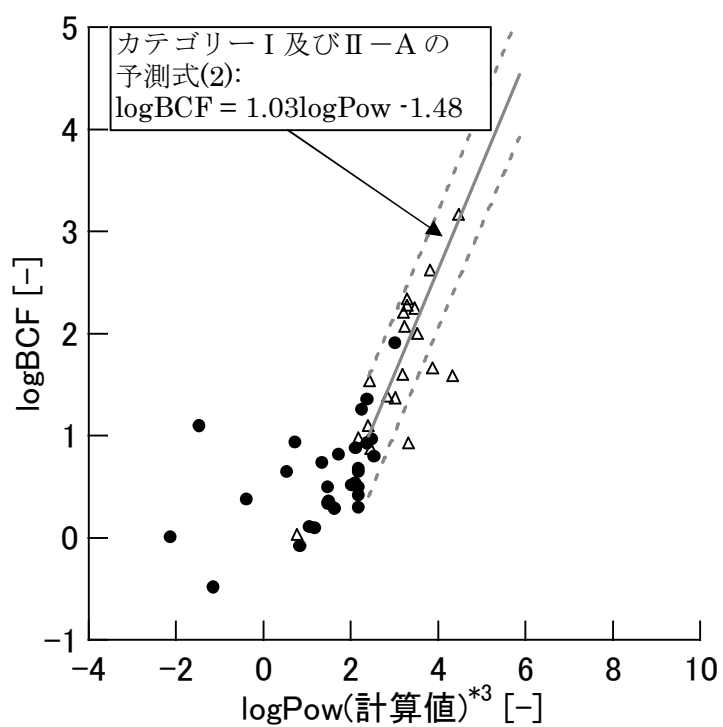


Fig.5c $\log Pow$ (計算値) vs. $\log BCF$ プロット(塩基性物質 48 物質)
 [●: $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール(29 物質)、△: $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール(19 物質)、
 ---: 予測式(2)の 95%信頼限界]

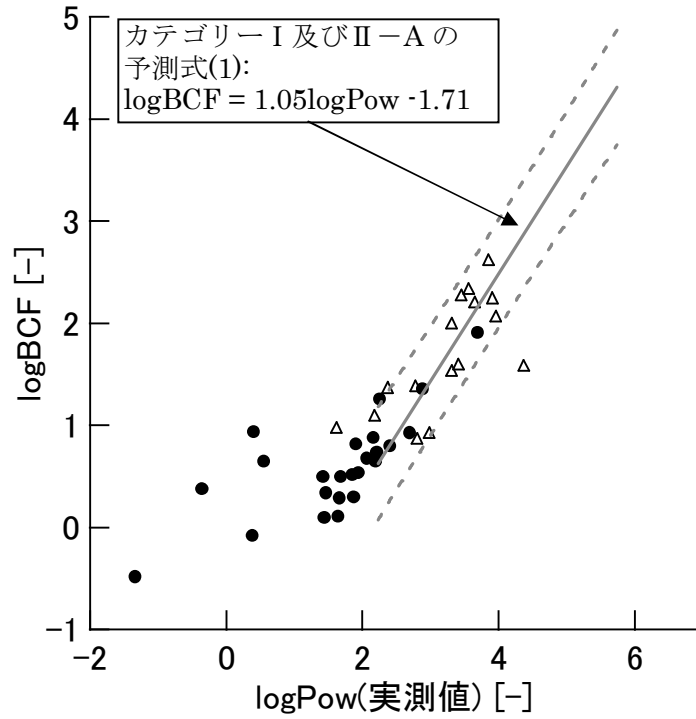


Fig.5d $\log Pow$ (実測値) vs. $\log BCF$ プロット(塩基性物質 40 物質)
 [●: $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール(24 物質)、△: $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール(16 物質)、
 ---: 予測式(1)の 95%信頼限界]

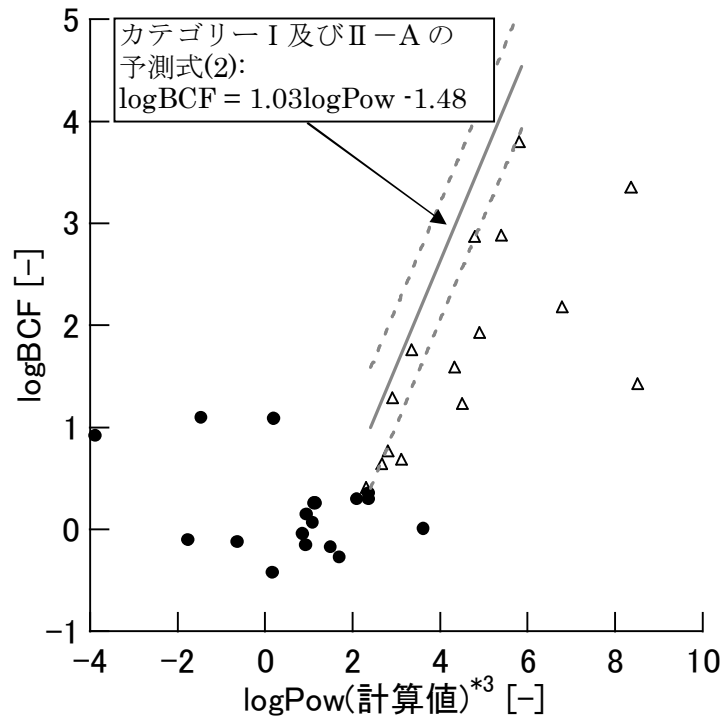


Fig.5e $\log Pow$ (計算値) vs. $\log BCF$ プロット(中性物質 33 物質)
 [●: $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール(18 物質)、△: $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール(15 物質)、
 ---: 予測式(2)の 95%信頼限界]

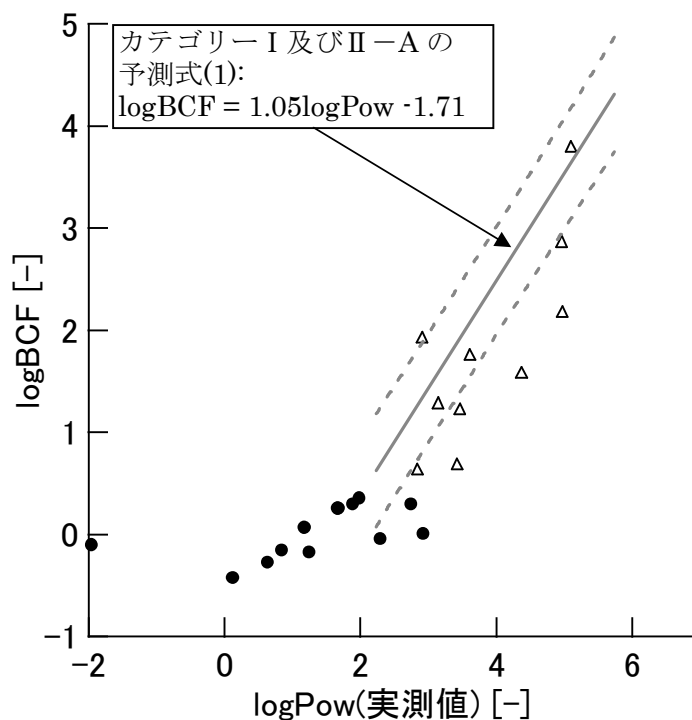


Fig.5f logPow(実測値) vs. logBCF プロット(中性物質 23 物質)
 [●:Dmax<11 Å のフェノール(13 物質)、△:Dmax≥11 Å のフェノール(10 物質)、
 - -: 予測式(1)の 95%信頼限界]

Table9 各物質群の Read-across を用いた生物濃縮性予測における
 Dmax、イオン存在割合、logPow の適用範囲

物質群	Dmax*4 [Å]	水中 (pH=7.77) での イオン存在割合 [%]	logPow	
			実測値	計算値*3
酸性物質 (66物質)	8.32~22.46	0~99.9	0.55~6.74	1.30~8.99
塩基性物質 (48物質)	6.51~14.03	0~99.8	-1.34~4.37	-2.13~4.47
中性物質 (34物質)	6.96~34.41	0~64.7	-1.96~5.10	-3.89~8.51

Fig.5a~Fig.5f から、酸性物質、塩基性物質、中性物質は、全ての物質群で logPow と logBCF は相関性を示したが、全体的に、logPow から期待される logBCF の予測値(カテゴリー I 及び II-A の予測式(1)、(2)から算出)よりも実測値が低い傾向を示した。これは、今まで述べたようにカテゴリー II-B の生物濃縮性に水素結合性相互作用、代謝(一部の物質において解離性相互作用)が影響しているため、全体的に低濃縮の傾向を示したと考えられる。また、酸性物質、塩基性物質、中性物質の logPow と logBCF との相関性の全体傾向は、それぞれ異なるものであった。これは 5.3.1 に述べているように、分子構造や官能基、またはそれに起因する物理化学的性状の違いが原因と考えられる。従って、ここでは分子構造に基づいて、酸性物質(フェノール類)、塩基性物質(アミン類)、中性物質(アルコール類)のそれぞれに分けて検討を行い、さらに分子構造や物性の類似性を考慮した細分類化(サブカテゴリー)の定義を試みた。また、両性物質 1 物質(No.94)については、類似な類縁物質がないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

5.5 分子構造や物性の類似性を考慮した Read-across(類推)を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群について

カテゴリーⅡ-Bに該当する物質の「基本骨格」、「官能基」、「Dmax」、「logPow」、「水中におけるイオン存在割合」の5つを考慮した Read-across を用いた生物濃縮性予測の検討結果から、Read-across を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群の例及びその適用範囲を 5.5.1～5.5.4 に示す。

5.5.1 フェノール 63 物質の物理化学的性状及び生物濃縮挙動について

物理化学的性状の類似な物質群に細分類するために、イオン存在割合=10%と Dmax=11 Å を閾値に用いて、カテゴリーⅡ-Bに該当するフェノール 63 物質を次の4つの物質群に分類した(Table10)。カテゴリーⅡ-B に該当するフェノール 63 物質における細分類結果と Read-across を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群の例の関係を Table11 に示す。また、4つの物質群の logPow(計算値)と logBCF とのプロットを Fig.6a、logPow(実測値)と logBCF とのプロットを Fig.6b に示す。

Table10 フェノール 63 物質の物理化学的性状(イオン存在割合、Dmax)による細分類の結果

物質群	該当物質数 (logPow が実測されている物質数)
①イオン存在割合<10%かつ Dmax<11 Å	16 物質(13 物質)
②イオン存在割合<10%かつ Dmax≥11 Å	23 物質(15 物質)
③イオン存在割合≥10%かつ Dmax<11 Å	20 物質(20 物質)
④イオン存在割合≥10%かつ Dmax≥11 Å	4 物質(3 物質)

合計 63 物質(51 物質)

Table11 フェノール 63 物質の物理化学的性状(イオン存在割合、Dmax)及び分子構造による細分類結果と Read-across を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群の例の関係

Table10 の結果		基本骨格による細分類結果とデータセットに用いた 144 物質における該当物質数	Read-across で予測可能と 判断した物質群の例	適用範囲
63 物 質 (51)	①に該当する 16 物質(13)	芳香環を 1 つのみ持つ フェノール 16 物質(13)	(エ)単環フェノール 1 16 物質(13)	p.29 参照
	②に該当する 23 物質(15)	芳香環を 1 つのみ持つ フェノール 9 物質(7)	(オ)単環フェノール 2 6 物質(5)	p.31 参照
		2 つの芳香環を持つ フェノール 9 物質(6)	(キ)ジフェニルメタン骨格 またはビフェニル骨格を持 つフェノール 7 物質(5)	p.33 参照
		その他の分子構造を 持つフェノール 5 物質(2)	—	—
	③に該当する 20 物質(20)	芳香環を 1 つのみ持つ フェノール 20 物質(20)	(カ)単環フェノール 3 17 物質(17)	p.36 参照
	④に該当する 4 物質(3)	その他の分子構造を 持つフェノール 4 物質(3)	—	—

※括弧内の数字は logPow が実測されている物質数

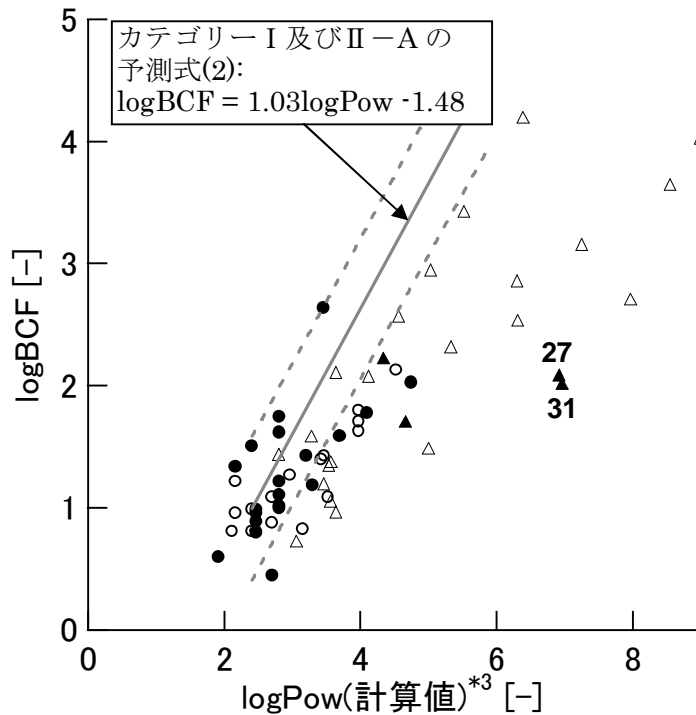


Fig.6a logPow(計算値) vs. logBCF プロット(フェノール 63 物質)

[○:①イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール(16 物質)、
△:②イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール(23 物質)、
●:③イオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール(20 物質)、
▲:④イオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール(4 物質)、
--: 予測式(2)の 95%信頼限界]

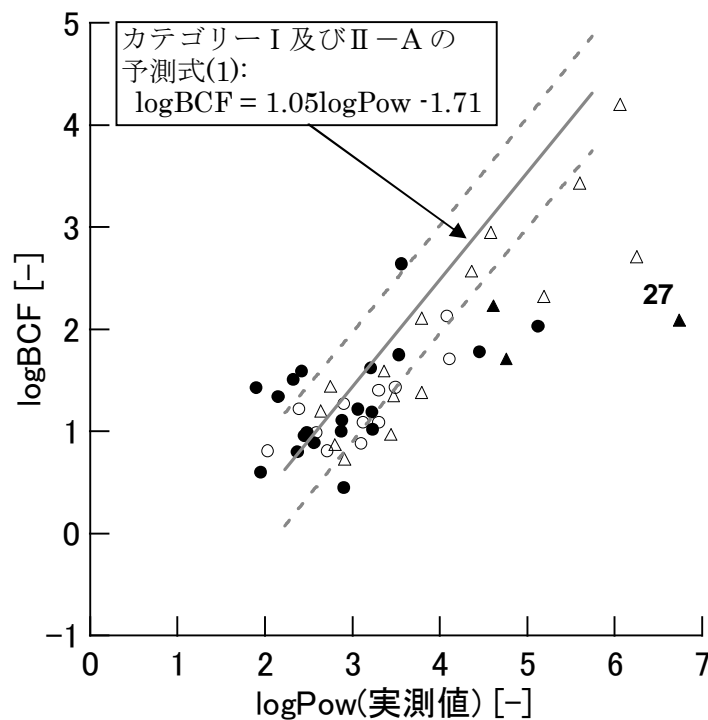


Fig.6b logPow(実測値) vs. logBCF プロット(logPow が実測されているフェノール 51 物質)

[○:①イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール(13 物質)、
△:②イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール(15 物質)、
●:③イオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール(20 物質)、
▲:④イオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール(3 物質)、
--: 予測式(1)の 95%信頼限界]

Fig.6a、6b から、イオン存在割合が 10%以上(③及び④)の 24 物質(logPow が実測されている物質は 23 物質)の生物濃縮性は、全て 1,000 倍未満(logBCF<3)であった。また、イオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール 4 物質の中で、logPow が大きい No.27 (logPow(実測値)=6.74、logPow(計算値)=6.92)、No.31(logPow(計算値)=6.96)の 2 物質は、logPow が同程度の値であるイオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノールよりも生物濃縮性が低い傾向にある。この結果は、イオン存在割合が 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノールの生物濃縮性において、分子サイズ(D_{max})だけではなく、解離性が影響している可能性を示している。

また、フェノールの生体内への取り込み速度における解離性の影響について、Saarikoski らは、Guppy におけるペンタクロロフェノール、2,4,6-トリクロロフェノールの生体内への取り込み速度を測定し、試験水中におけるイオン存在割合が約 10% ($\text{pH}-\text{pKa}$ 値が-1)を超えると、化学物質の生体への取り込み速度が減少したことを報告している²⁴⁾。フェノールは、ヒドロキシル基のプロトンが解離することによって水中でアニオンとして存在し、物質の生体膜透過において生体膜の構成成分であるリン脂質(PC、PE、PS など)のリン酸基のアニオン部位と化学物質のアニオン部位が反発することで、非解離状態の物質よりも生体膜透過が不利になることが想定される。

これらのことから、フェノールのイオン存在割合が約 10%以上の物質は、生物濃縮性における解離性の影響を無視できないと考えられるため、Read-across に用いる類縁物質の選択にはイオン存在割合が約 10%以上の物質を区別することが必要である。

* 7 カテゴリー II -B に該当する 144 物質の中で、濃縮度試験における pH が実測されている 59 物質の平均値(7.77)を用いた。
* 8 pKa が実測されている場合には、実測値を使用。pKa が実測されていない場合には、ACD pKa DB ver.12.0 を用いて算出。

①イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール 16 物質の生物濃縮挙動について

これらの 16 物質(データセット A、別添 2 の Table2-3)は、基本骨格が単環フェノール、置換基に炭化水素基、ハロゲン基、スルフィド基が 1~3 置換した物質で、類似な構造を持つ物質である。また、これらの 16 物質の logPow(計算値)または logPow(実測値) と logBCF のプロットを Fig.7a、7b に示す。

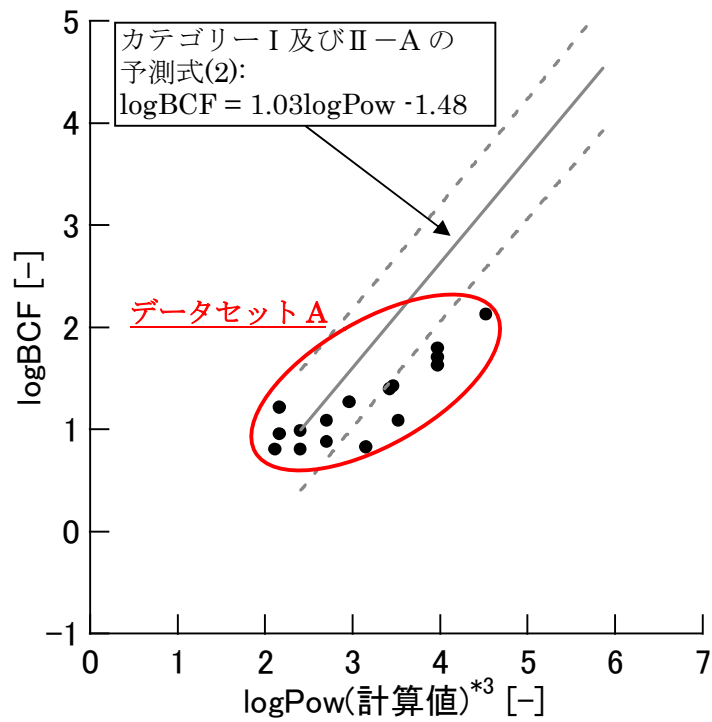


Fig.7a logPow(計算値) vs. logBCF プロット(イオン存在割合 10%未満かつ Dmax<11 Å のフェノール 16 物質) [---: 予測式(2)の 95%信頼限界]

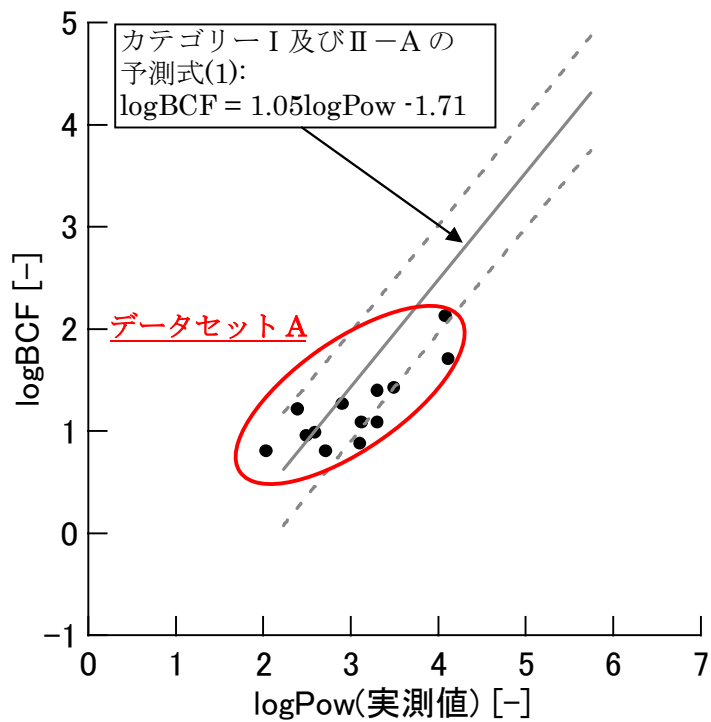
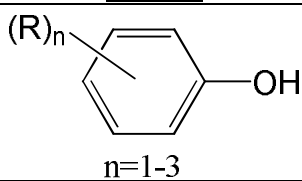


Fig.7b logPow(実測値) vs. logBCF プロット(イオン存在割合 10%未満かつ Dmax<11 Å のフェノール 13 物質) [---: 予測式(1)の 95%信頼限界]

Fig.7a、7b の結果から、データセット A は $2.03 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 4.11$ 、 $2.11 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 4.53$ の範囲で、 $\log\text{Pow}$ が増加すると $\log\text{BCF}$ も増加する傾向にあり、 $\log\text{Pow}$ が近い物質は同程度の生物濃縮性を示す。このことから、次の条件に当てはまる未試験の「単環フェノール 1」は、データセット A を用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験の「単環フェノール 1」の条件:]

[1]	基本骨格：単環フェノールかつベンゼン 1-3 置換体
[2]	置換基：R = (1)~(11)の置換基
[3]	イオン存在割合が 10%未満($\text{pH}-\text{pK}_a < -1$)
[4]	$2.03 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 4.11$ または $2.11 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 4.52$
[5]	$D_{\text{max}} < 11 \text{ \AA}$
基本骨格	
 <p style="text-align: center;">$n=1-3$</p>	

②イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{\text{max}} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール 23 物質の生物濃縮挙動について

イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{\text{max}} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール 23 物質(別添 2 の Table2-4)は、基本骨格及び置換基の違いから、「芳香環を 1 つのみ持つフェノール 9 物質」(別添 2 の Table2-5)、「2 つの芳香環を持つフェノール 9 物質」(別添 2 の Table2-6)、「その他の分子構造を持つフェノール 5 物質」(別添 2 の Table2-7)の 3 つの物質群に分類できると考えられる。

②-1. 「芳香環を 1 つのみ持つフェノール 9 物質」の生物濃縮挙動について

これらの 9 物質の $\log\text{Pow}(\text{計算値})$ または $\log\text{Pow}(\text{実測値})$ と $\log\text{BCF}$ のプロットを Fig.8a、8b に示す。

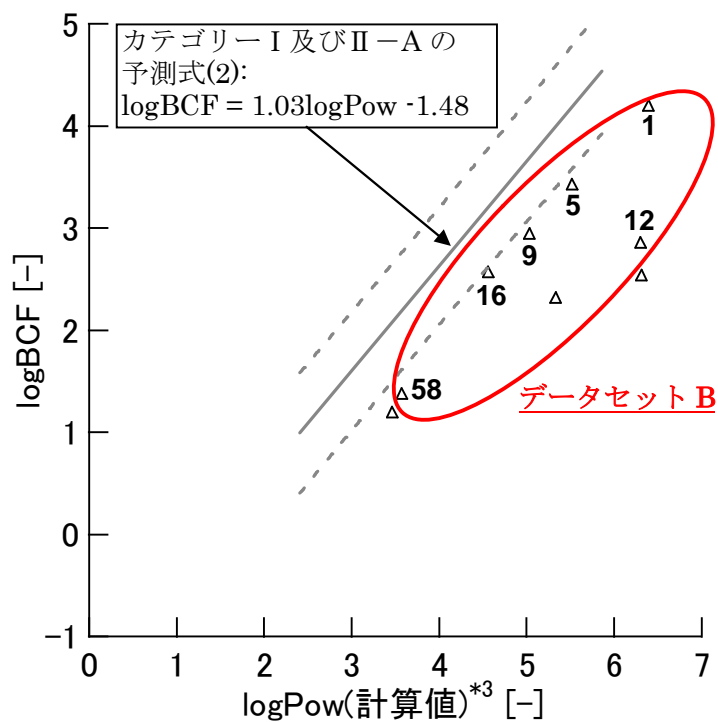


Fig.8a $\log\text{Pow}$ (計算値) vs. $\log\text{BCF}$ プロット(イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{\text{max}} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香環を 1 つのみ持つフェノール 9 物質)
[--: 予測式(2)の 95%信頼限界]

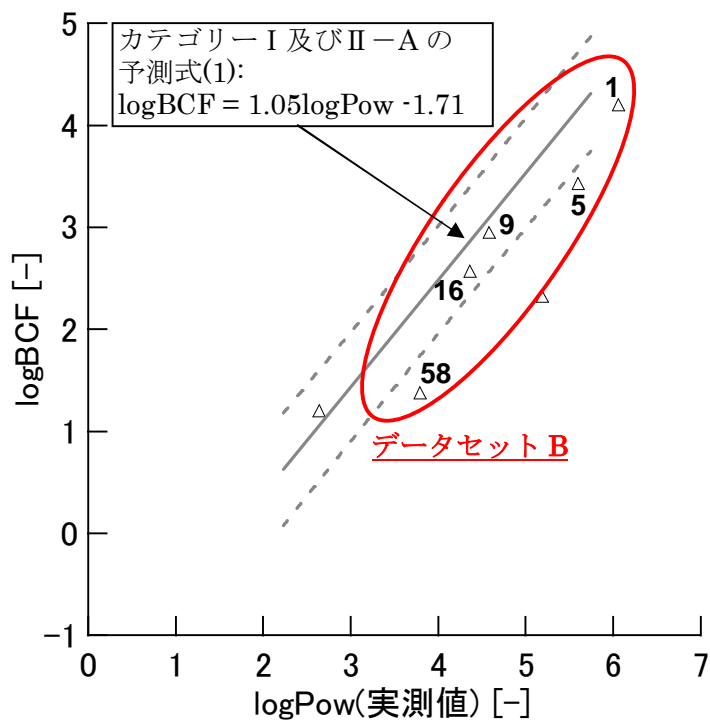
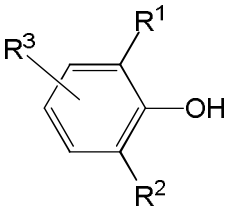


Fig.8b $\log\text{Pow}$ (実測値) vs. $\log\text{BCF}$ プロット(イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{\text{max}} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香環を 1 つのみ持つフェノール 7 物質)
[--: 予測式(1)の 95%信頼限界]

イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の「芳香環を 1 つのみ持つフェノール 9 物質」は、基本骨格がフェノールかつ芳香環を 1 つのみ持つ物質で、ヒドロキシル基のオルト位またはパラ位に *tert*-ブチル基、イソプロピル基、シクロヘキシル基などのかさ高い置換基を有している類似な構造を持つ物質群である。これらの 9 物質の中で、ヒドロキシル基のオルト位に 2 つのかさ高い置換基を持つフェノール 5 物質(No.1, 5, 9, 16, 58)は、 $\log Pow$ (計算値)または $\log Pow$ (実測値)と $\log BCF$ との相関が強い傾向にある。これは、ヒドロキシル基のオルト位に置換している 2 つのかさ高い置換基による立体障害によってヒドロキシル基に他の分子が接近しにくくなり、化学物質と水分子または生体分子との水素結合性相互作用やヒドロキシル基における代謝反応などの化学物質の生物濃縮性に影響を与える要因が小さくなったため、 $\log Pow$ (計算値)または $\log Pow$ (実測値)と $\log BCF$ が良い相関を持ったと考えられる。No. 12 の物質は、No.1, 5, 9, 16, 58 の場合と同様に化学物質と水分子または生体分子との水素結合性相互作用やヒドロキシル基における代謝反応などの化学物質の生物濃縮性に影響を与える要因が小さくなると考えられるが、ヒドロキシル基のオルト位に 2 つのかさ高い置換基を持つ他のフェノール 5 物質 (No.1, 5, 9, 16, 58) と比較すると $\log Pow$ (計算値)と $\log BCF$ の相関が弱い傾向にある。No.12 は $\log Pow$ が実測されていないことから、 $\log Pow$ (計算値)の計算誤差が原因で、 $\log Pow$ (計算値)と $\log BCF$ の相関が弱い傾向にあったと考えられる。これらのことを考慮すると、ヒドロキシル基のオルト位に 2 つの置換基を持つ 6 物質(No.1, 5, 9, 12, 16, 58) は、 $3.79 \leq \log Pow(\text{実測値}) \leq 6.06$ 、 $3.57 \leq \log Pow(\text{計算値}) \leq 6.39$ の範囲で $\log Pow$ が増加すると $\log BCF$ も増加する傾向にあり、 $\log Pow$ が近い物質は同程度の生物濃縮性を示すことから、次の条件に当てはまる未試験の「単環フェノール 2」は、データセット B(別添 2 の Table2-8)を用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。ただし、 $\log Pow$ (計算値)を用いて Read-across を行う場合には、類縁物質の $\log Pow$ (実測値)と $\log Pow$ (計算値)を比較して、 $\log Pow$ (計算値)の予測精度について検討することが必要である。また、ヒドロキシル基のオルト位の 2 つのかさ高い置換基(*tert*-ブチル基、*iso*-ブチル基、*iso*-プロピル基、シクロヘキシル基など)が置換してない場合には、ヒドロキシル基に他の分子が接近し易くなり、化学物質と水分子または生体分子との水素結合性相互作用やヒドロキシル基における代謝反応などの影響で、化学物質の生物濃縮性が低下する可能性がある。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験の「単環フェノール 2」の条件:]

[1]	基本骨格：下記の基本骨格を持つ単環フェノール
[2]	置換基：R1, R2, R3 = (1)~(11)の置換基
[3]	イオン存在割合が 10%未満($pH - pKa < -1$)
[4]	$3.79 \leq \log Pow(\text{実測値}) \leq 6.06$ または $3.57 \leq \log Pow(\text{計算値}) \leq 6.39$
[5]	$D_{max} \leq 14.86 \text{ \AA}$
基本骨格	
	

イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のヒドロキシル基のオルト位に 2 つのかさ高い置換基を持たないフェノール 3 物質 (No.17, 19, 69) は、類縁物質が少ないことやヒドロキシル基に他の分子が接近し易くなり、化学物質と水分子または生体分子との水素結合性相互作用やヒドロキシル基における代謝反応などの影響で化学物質の生物濃縮性が低下しやすいことを踏まえ、イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香環を「1 つのみ持つフェノール 9 物質」を用いて、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

②-2. 「芳香環を 2 つ持つフェノール 9 物質」の生物濃縮挙動について

これらの 9 物質の $\log Pow$ (計算値) または $\log Pow$ (実測値) と $\log BCF$ のプロットを Fig.8c、8d に示す。

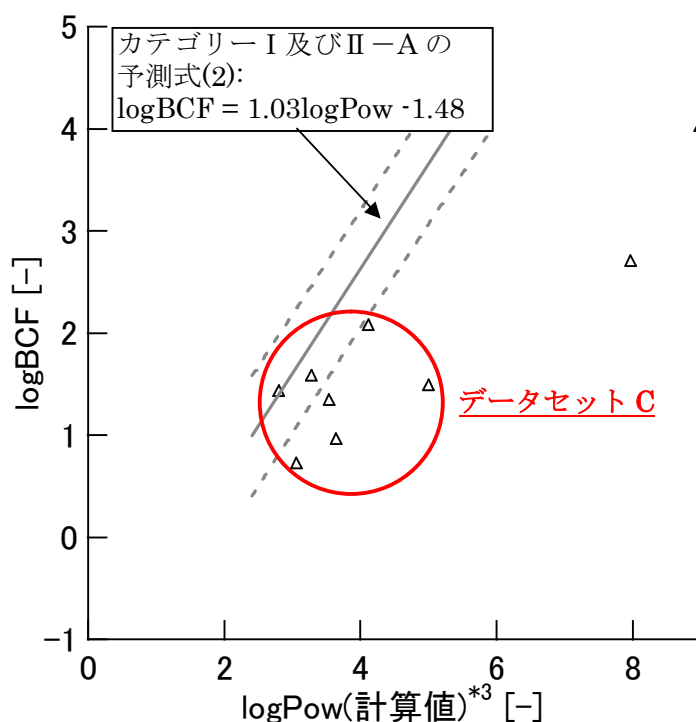


Fig.8c $\log Pow$ (計算値) vs. $\log BCF$ プロット (イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の 2 つの芳香環を持つフェノール 9 物質)

[---: 予測式(2)の 95%信頼限界]

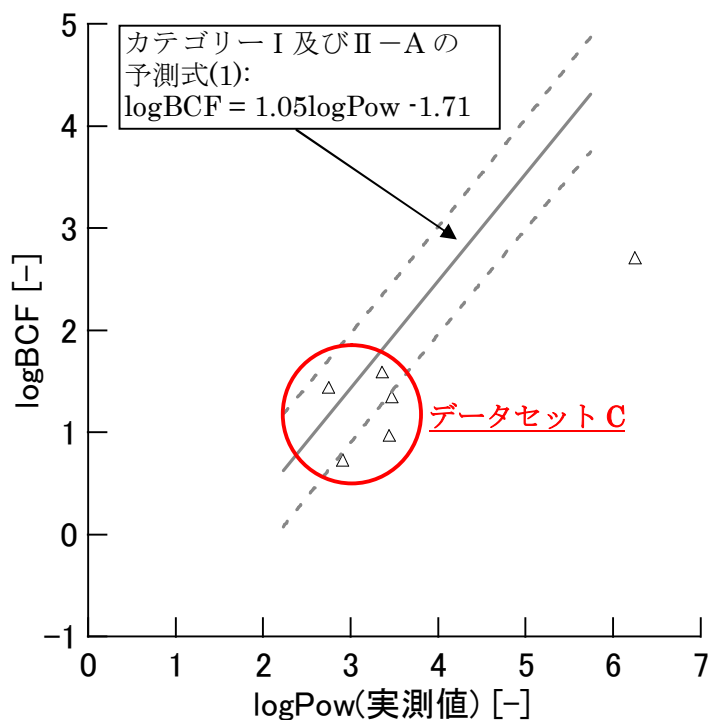


Fig.8d logPow(実測値) vs. logBCF プロット(イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の 2 つの芳香環を持つフェノール 6 物質)
 [---: 予測式(1)の 95%信頼限界]

これらの 9 物質は、基本骨格がジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格で、置換基が全て炭化水素基である類似な構造を持つ物質である。これらの 9 物質の中で、フェノール骨格のパラ位にのみ置換基を持つ 7 物質(データセット C、No.28, 46, 50, 53, 61, 86, 103)は、 $2.75 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 3.47$ 、 $2.80 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 5.00$ の範囲で、 $0.71 \leq \log\text{BCF} \leq 2.06$ と同程度の生物濃縮性を示すことから、次の条件に当てはまる未試験の「ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つフェノール」は、データセット C を用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。また、フェノール骨格のパラ位に置換基を持たない 2 物質(No.2, 13)については、類縁物質が少ないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験の「ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つフェノール」の条件:]

[1]	基本骨格: ビフェニル骨格またはジフェニルメタン骨格を持つフェノール
[2]	置換基: $R^1=(1) \sim (11)$ の置換基、 $R^2=(1) \sim (11)$ の置換基またはヒドロキシル基
[3]	イオン存在割合が 10%未満($\text{pH} - \text{pKa} < -1$)
[4]	$2.75 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 3.47$ または $2.80 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 5.00$
[5]	$D_{max} \leq 12.67 \text{ \AA}$
基本骨格	

②-3. 「その他の分子構造を持つフェノール 5 物質」の生物濃縮挙動について

これらの 5 物質(別添 2 の Table2-7)の logPow(計算値)または logPow(実測値) と logBCF のプロットを Fig.8e、8f に示す。

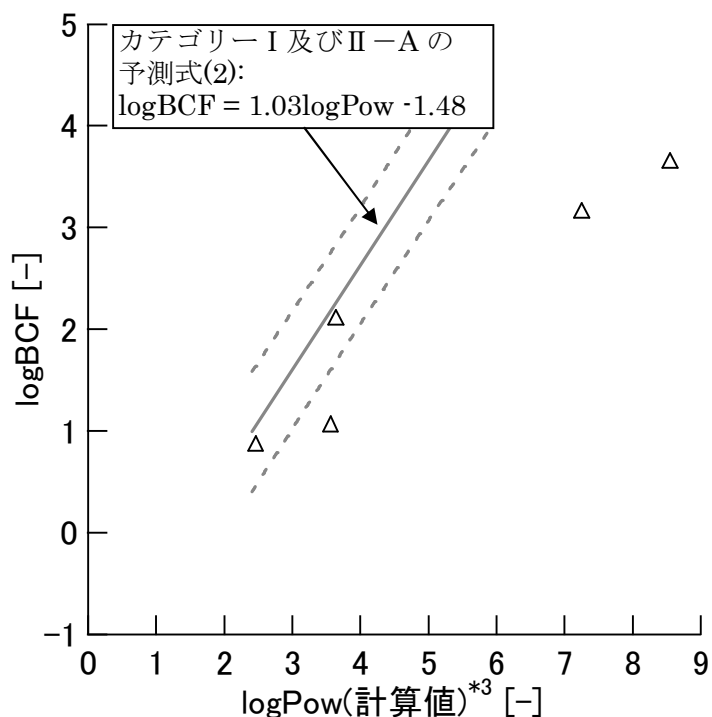


Fig.8e logPow(計算値) vs. logBCF プロット(イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のその他の分子構造を持つフェノール 5 物質)
[---: 予測式(2)の 95%信頼限界]

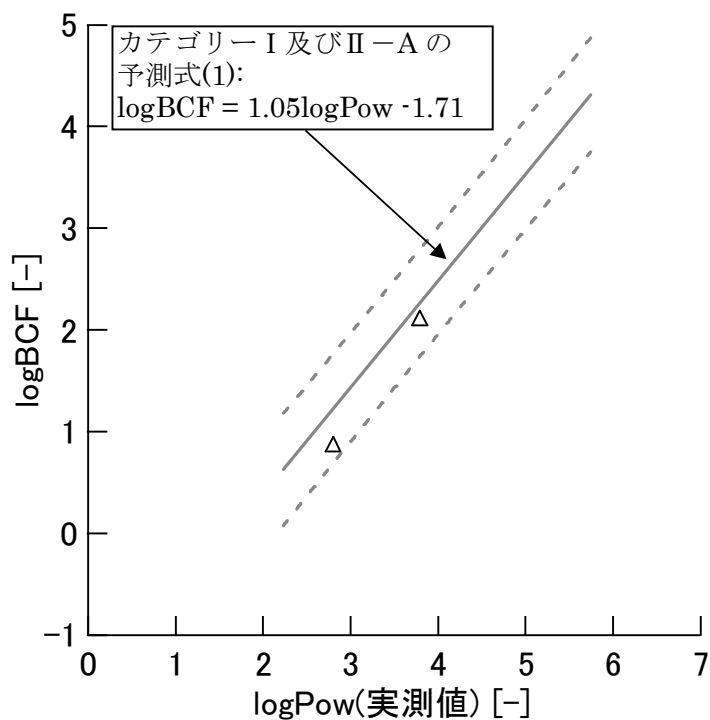


Fig.8f logPow(実測値) vs. logBCF プロット(イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のその他の分子構造を持つフェノール 2 物質)
[---: 予測式(1)の 95%信頼限界]

これらの5物質(別添2のTable2-7)は、それぞれ2-[ニトロフェニル]ジアゼニル骨格(No.4)、トリアゾール骨格(No.8)、アントラキノン骨格(No.26)及びヒドロキシル基(No.76)、アミノ基(No.94)などのフェノール以外の基本骨格及びヒドロキシル基以外の水素結合性ドナーを持つ物質で、類縁物質が少ないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

③イオン存在割合が10%以上かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール 20 物質の生物濃縮挙動について

これらの20物質(別添2のTable2-9)の $\log Pow$ (計算値)または $\log Pow$ (実測値) と $\log BCF$ のプロットを Fig.9a、9b に示す。これらの20物質は、全て基本骨格が単環フェノール、置換基に炭化水素基、ハロゲン基、ニトロ基が1~5置換した物質で、類似な構造を持つ物質群である。

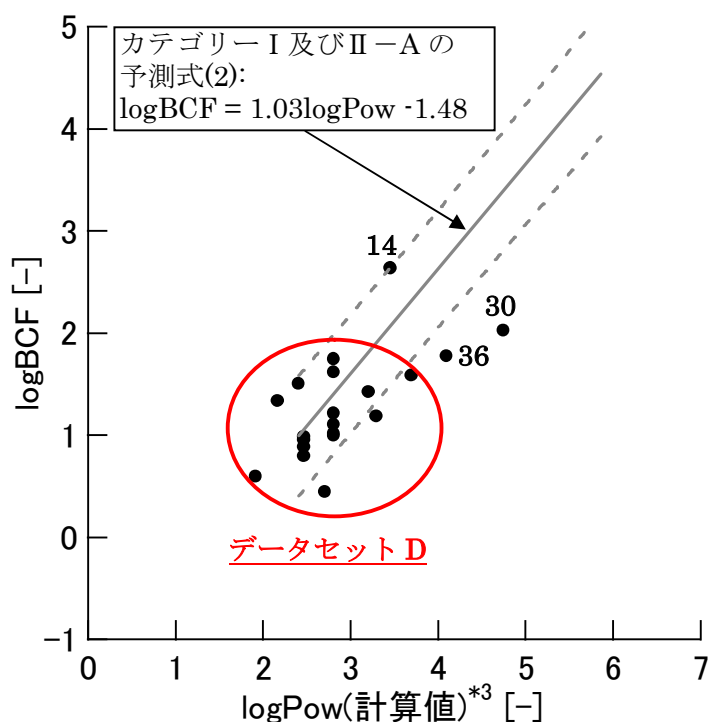


Fig.9a $\log Pow$ (計算値) vs. $\log BCF$ プロット
(イオン存在割合が10%以上かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール 20 物質)
[---: 予測式(2)の95%信頼限界]

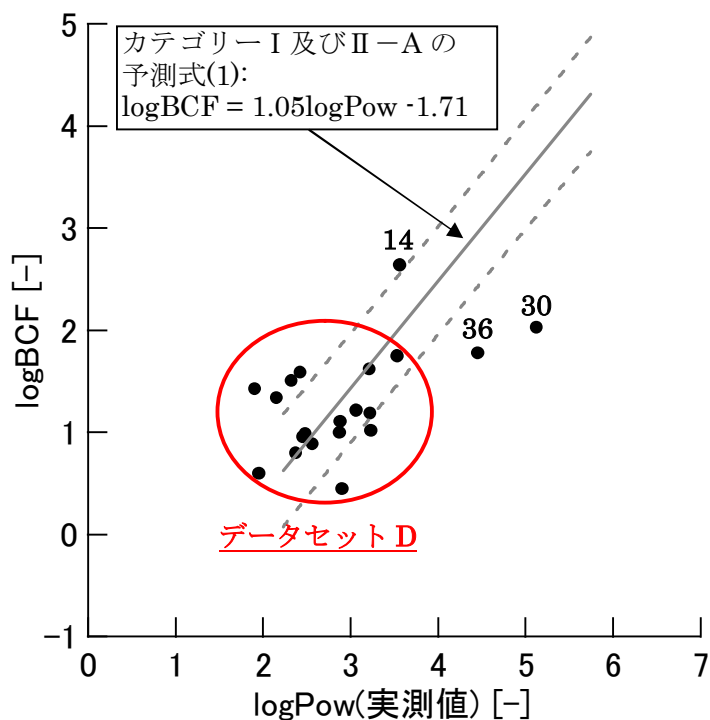


Fig.9b logPow(実測値) vs. logBCF プロット
 (イオン存在割合が 10%以上かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ のフェノール 20 物質)
 [---: 予測式(1)の 95%信頼限界]

これらの 20 物質の中で、logPow が小さい物質は生体内へ取り込まれにくいことから、生物濃縮性における解離性の影響を受けにくいと考えられる。このことを踏まえると、 $1.90 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 3.53$ 、 $1.91 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 3.69$ の範囲にある 17 物質(No.14, 30, 36 を除く)は、logBCF が 0.45~1.75 の範囲に分布し、低濃縮($\log\text{BCF} < 2$)の傾向を示すことから、次の条件に当てはまる未試験の「単環フェノール 3」は、データセット D(別添 2 の Table2-10)を用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験の「単環フェノール 3」の条件:]

[1]	基本骨格：単環フェノールかつベンゼン 1-3 置換体
[2]	置換基：R = (1)~(11)の置換基
[3]	イオン存在割合が 10%以上($\text{pH} - \text{pK}_a \geq -1$)
[4]	$1.90 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 3.53$ または $1.91 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 3.45$
[5]	$D_{max} < 11 \text{ \AA}$
基本骨格	

No.14, 30, 36 については、その他の 17 物質とは生物濃縮性が異なることが考えられるため、個別に Read-across による定性的な予測を行う。

④イオン存在割合が 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール 4 物質の生物濃縮挙動について

これらの 4 物質(別添 2 の Table2-11)の $\log Pow$ (計算値)または $\log Pow$ (実測値) と $\log BCF$ のプロットを Fig.10a、10b に示す。 これらの 4 物質は、類似な構造及び物理化学的性状を持つ物質が少ないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

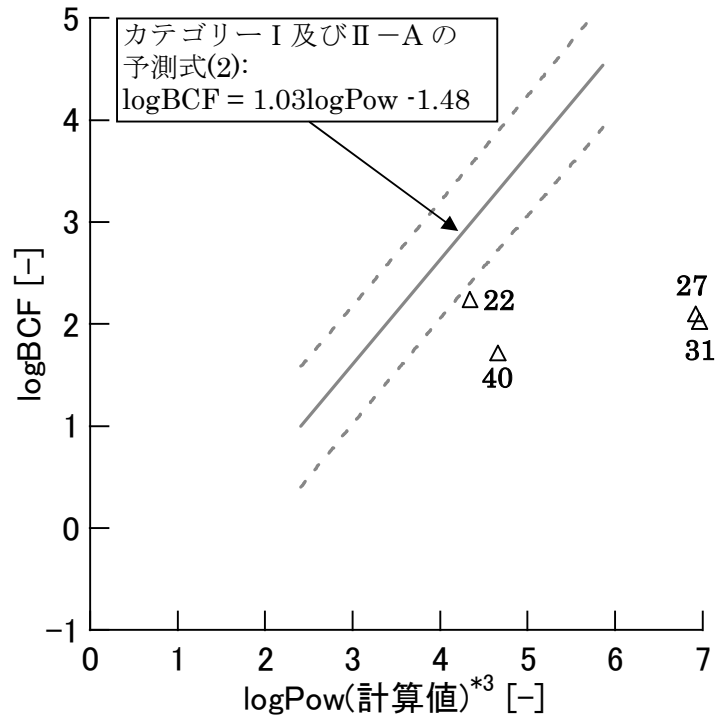


Fig.10a $\log Pow$ (実測値) vs. $\log BCF$ プロット
 (イオン存在割合が 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール 4 物質)
 [---: 予測式(2)の 95%信頼限界]

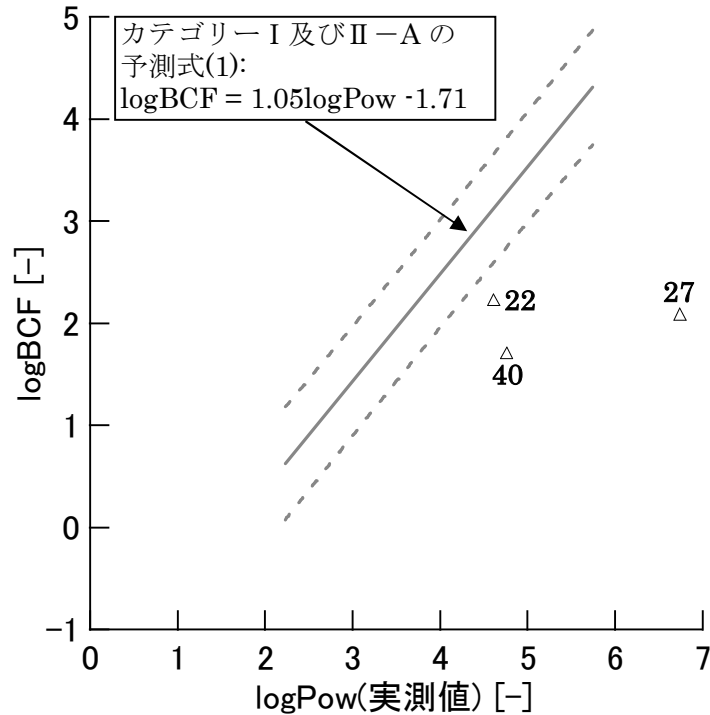


Fig.10b logPow(実測値) vs. logBCF プロット
 (イオン存在割合が 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ のフェノール 3 物質)
 [---: 予測式(1)の 95%信頼限界]

5.5.2 芳香族 1 級または 2 級アミン 44 物質の物理化学的性状及び生物濃縮挙動について

物理化学的性状の類似な物質群に細分類するために、イオン存在割合=10%と $D_{max}=11 \text{ \AA}$ を閾値に用いて、カテゴリー II-B に該当する芳香族 1 級または 2 級アミン 44 物質(別添 2 の Table2-12)を次の 4 つの物質群に分類した(Table12)。カテゴリー II-B に該当する芳香族 1 級または 2 級アミン 44 物質における細分類結果と Read-across を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群の例の関係を Table13 に示す。また、4 つの物質群の logPow(計算値)または logPow(実測値)と logBCF とのプロットを Fig.11a、 Fig.11b に示す。

Table12 芳香族 1 級または 2 級アミン 44 物質の物理化学的性状
 (イオン存在割合、 D_{max})による細分類の結果

	物質群	該当物質数 (logPow が実測されている物質数)
①	イオン存在割合<10%かつ $D_{max}<11 \text{ \AA}$	24 物質(21 物質)
②	イオン存在割合<10%かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$	19 物質(16 物質)
③	イオン存在割合 $\geq 10\%$ かつ $D_{max}<11 \text{ \AA}$	1 物質(1 物質)
④	イオン存在割合 $\geq 10\%$ かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$	0 物質(0 物質)

合計 44 物質(38 物質)

Table13 芳香族 1 級または 2 級アミン 44 物質の物理化学的性状(イオン存在割合、 D_{max})及び分子構造による細分類結果と Read-across を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群の例の関係

Table12 の結果		基本骨格による細分類結果とデータセットに用いた 144 物質における該当物質数	Read-across で予測可能と 判断した物質群の例	適用範囲
44 物 質 (38)	①に該当する 24 物質(21)	単環アルキルアニリン 17 物質(15)	(ク) 単環アルキルアニリン 17 物質(15)	p.43 参照
		ナフチルアミン 2 物質(2)	—	—
		複素環芳香族アミン 3 物質(3)	—	—
		その他の構造を持つ アミン 2 物質(1)	—	—
	②に該当する 19 物質(16)	ジフェニルメタン骨格 またはビフェニル骨格 を持つアミン 5 物質(5)	(ケ) ジフェニルメタン骨格 またはビフェニル骨格を 持つアミン 5 物質(5)	p.46 参照
		ジフェニルアミン骨格 を持つアミン 4 物質(3)	—	
		複素環芳香族アミン 5 物質(4)	(コ)トリアジン骨格を持つ アミン 2 物質(2)	p.47 参照
		その他の骨格を持つ物 質 5 物質(4)	(サ)アントラキノン骨格を 持つアミン 2 物質(2)	p.47 参照
	③に該当する 1 物質(1)	ベンジルアミン 1 物質 (1)	—	—
	④に該当する 0 物質(0)	—	—	—

※括弧内の数字は logPow が実測されている物質数

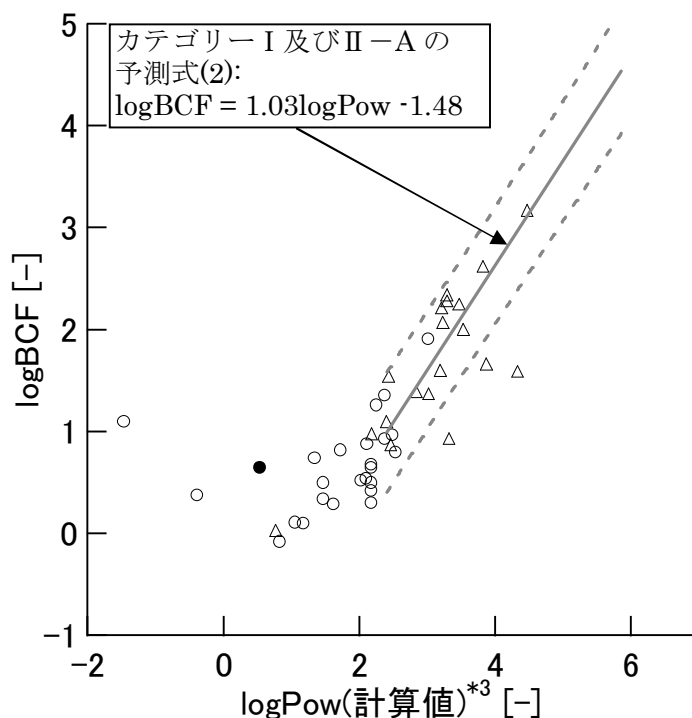


Fig.11a logPow(計算値) vs. logBCF プロット(logPow が実測されている芳香族 1 級または 2 級アミン 44 物質)

- [○: ①イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(24 物質)、
- △: ②イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(19 物質)、
- : ③イオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(1 物質)、
- ▲: ④イオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(該当なし)、
- : 予測式(2)の 95%信頼限界]

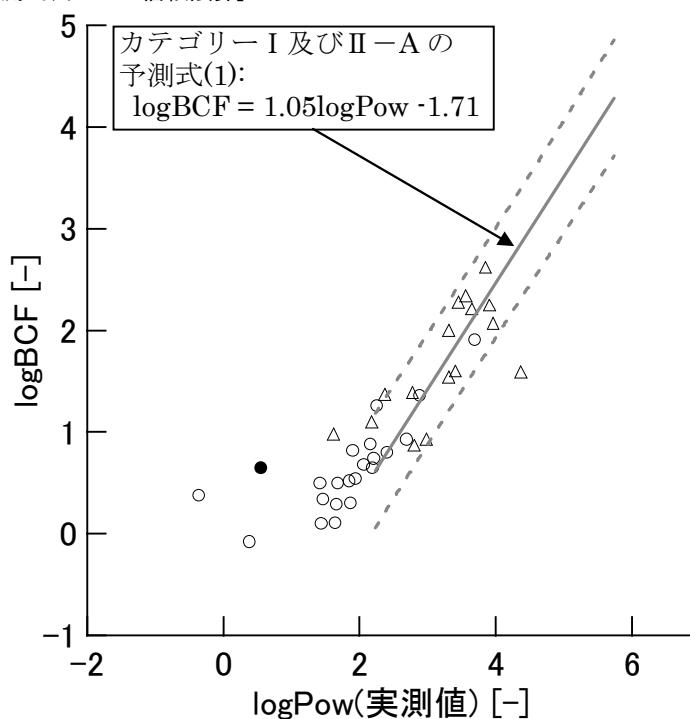


Fig.11b logPow(実測値) vs. logBCF プロット(logPow が実測されている芳香族 1 級または 2 級アミン 38 物質)

- [○: ①イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(21 物質)、
- △: ②イオン存在割合 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(16 物質)、
- : ③イオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(1 物質)、
- ▲: ④イオン存在割合 10%以上かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン(該当なし)、
- : 予測式(1)の 95%信頼限界]

芳香族 1 級または 2 級アミン 44 物質のイオン存在割合は、No.106 の 1 物質を除き、全て 10%未満であった。そのため、今回の検討に用いた芳香族 1 級または 2 級アミンの大部分の物質(43 物質)は、濃縮度試験水中において非解離状態で存在していると考えられる。

芳香族アミンはフェノールの場合とは異なり、物質の水中におけるイオン存在割合と生体膜透過速度との関係に関する研究等が行われていないが、フェノールの場合と同様に水中における物質のイオン存在割合が増加すると、水中でイオンとして存在する物質と生体膜を構成するリン脂質のアニオン部位との間にイオン性相互作用が働き、化学物質の生体への取り込み速度に影響すると考えられる。そのため、現時点ではフェノールの場合と同様に芳香族アミンのイオン存在割合が約 10%以上の物質は、生物濃縮性における解離性の影響を無視できないと考えられるため、Read-across に用いる類縁物質の選択にはイオン存在割合が約 10%以上の物質を区別して生物濃縮性予測の検討を行う。

①イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン 24 物質の生物濃縮挙動について

これらの 24 物質(別添 2 の Table2-13)は、基本骨格及び置換基の違いから、「単環アルキルアニリン 17 物質」、「ナフチルアミン 2 物質」、「複素環芳香族アミン 3 物質」及び「その他の構造を持つアミン 2 物質」の 4 つの物質群に分類できると考えられる。また、これらの 24 物質の $\log Pow$ (計算値)または $\log Pow$ (実測値)と $\log BCF$ とのプロットを Fig.12a、12b に示す。

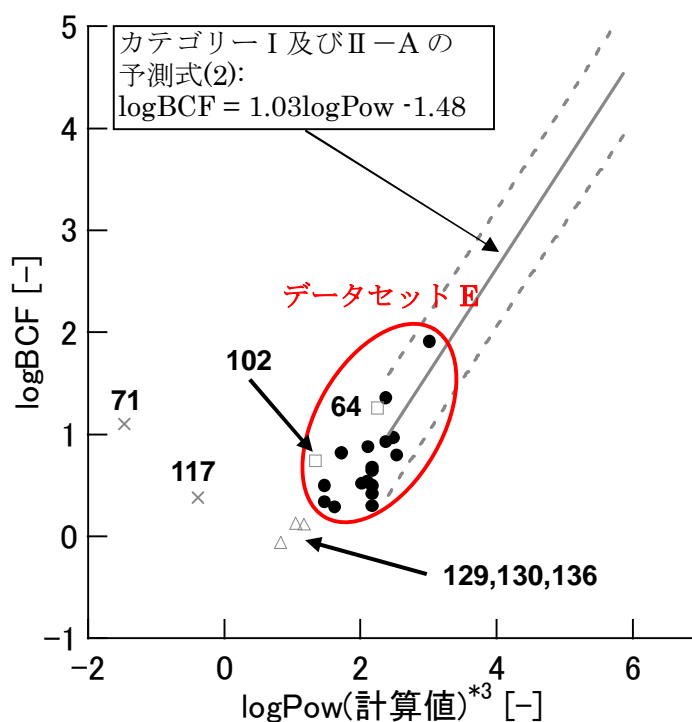


Fig.12a $\log Pow$ (計算値) vs. $\log BCF$ プロット(イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン 24 物質)

●: 単環アルキルアニリン(17 物質)、□: ナフチルアミン(2 物質)、
 △: 複素環芳香族アミン(3 物質)、×: その他の構造を持つアミン(2 物質)、
 --: 予測式(2)の 95%信頼限界]

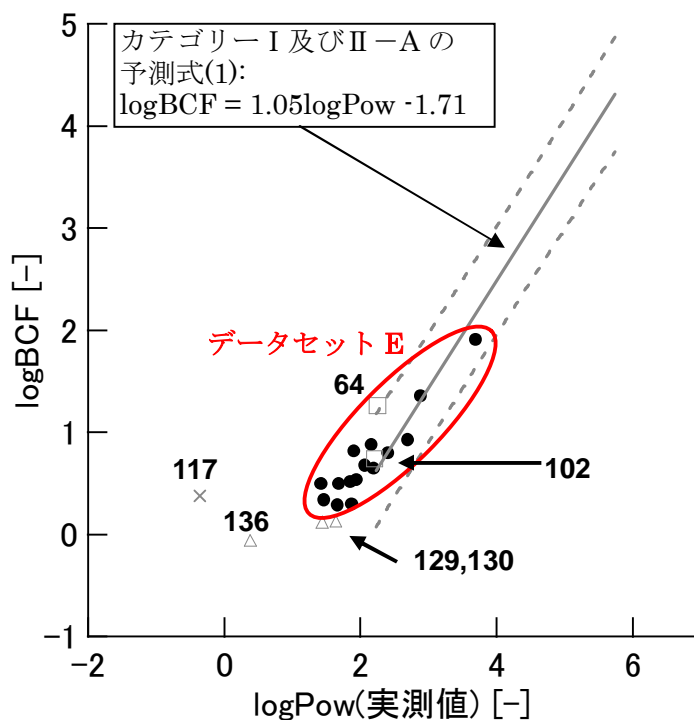


Fig.12b logPow(実測値) vs. logBCF プロット(イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン 21 物質)

【●: 単環アルキルアニリン(15 物質)、□: ナフチルアミン(2 物質)、
△: 複素環芳香族アミン(3 物質)、×: その他の構造を持つアミン(1 物質)、
--: 予測式(1)の 95%信頼限界】

①-1. 「単環アルキルアニリン 17 物質」の生物濃縮挙動について

これらの 17 物質(データセット E、別添 2 の Table2-14)は、基本骨格が単環アルキルアニリンで、置換基に炭化水素基、ハロゲン基、エーテル基及びニトロ基を持つ類似な構造を持つ物質である。また、これらの 17 物質は、 $1.42 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 3.69$ または $1.47 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 3.01$ の範囲で、 $\log\text{Pow}$ が増加すると $\log\text{BCF}$ も増加する傾向にあり、 $\log\text{Pow}$ が近い物質は同程度の生物濃縮性を示すことから、次の条件に当てはまる未試験の「単環アルキルアニリン」は、データセット E を用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験の「単環アルキルアニリン」の条件:]

[1]	基本骨格：単環アルキルアニリン骨格を持つ物質
[2]	置換基： R^1 、 $R^2 = (1) \sim (11)$ の置換基
[3]	イオン存在割合が 10%未満($\text{pH} - \text{pK}_a > 1$)
[4]	$1.42 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 3.69$ または $1.47 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 3.01$
[5]	$D_{max} < 11 \text{ \AA}$
基本骨格	

①-2.~①-4. 「ナフチルアミン 2 物質」、「複素環芳香族アミン 3 物質」、「その他の構造を持つアミン 2 物質」の生物濃縮挙動について

イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の「単環アルキルアニリン 17 物質」以外の「ナフチルアミン 2 物質」(No.64, 102)、「複素環芳香族アミン 3 物質」(No.129, 130, 136)、「その他の構造を持つアミン 2 物質」(No.71, 117)は、それぞれ分子構造、物理化学的性状及び生物濃縮性が類似な類縁物質の数が少ないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

②イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン 19 物質の生物濃縮挙動について

これらの 19 物質(別添 2 の Table2-15)は、基本骨格及び置換基の違いから、「ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つアミン 5 物質」、「ジフェニルアミン骨格を持つアミン 4 物質」、「複素環芳香族アミン 5 物質」及び「その他の分子構造を持つアミン 5 物質」の 4 つの物質群に分類できると考えられる。また、これらの 19 物質の $\log Pow$ (計算値)または $\log Pow$ (実測値)と $\log BCF$ とのプロットを Fig.13a、13b に示す。

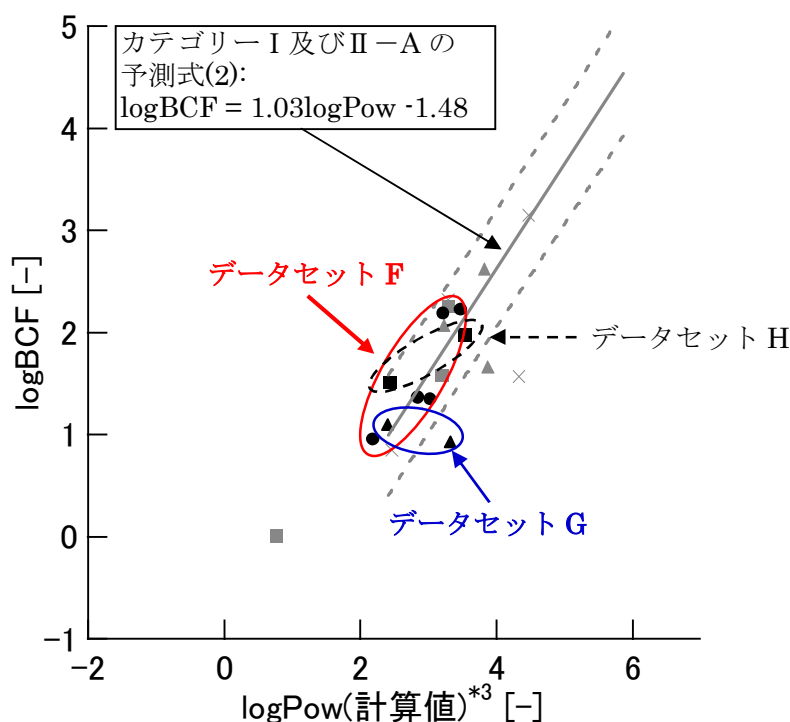


Fig.13a $\log Pow$ (計算値) vs. $\log BCF$ プロット(イオン存在割合が 10%未満かつ $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ かつ芳香族 1 級または 2 級アミン 19 物質)

- :ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つ物質(5 物質)、×:ジフェニルアミン骨格を持つ物質(4 物質)、
- ▲:複素環芳香族アミン(データセット G 2 物質)、△:複素環芳香族アミン(データセット G 以外の 3 物質)、
- :その他の骨格を持つ物質(データセット H 2 物質)、■:その他の骨格を持つ物質(データセット H 以外の 3 物質)、
- :予測式(2)の 95%信頼限界]

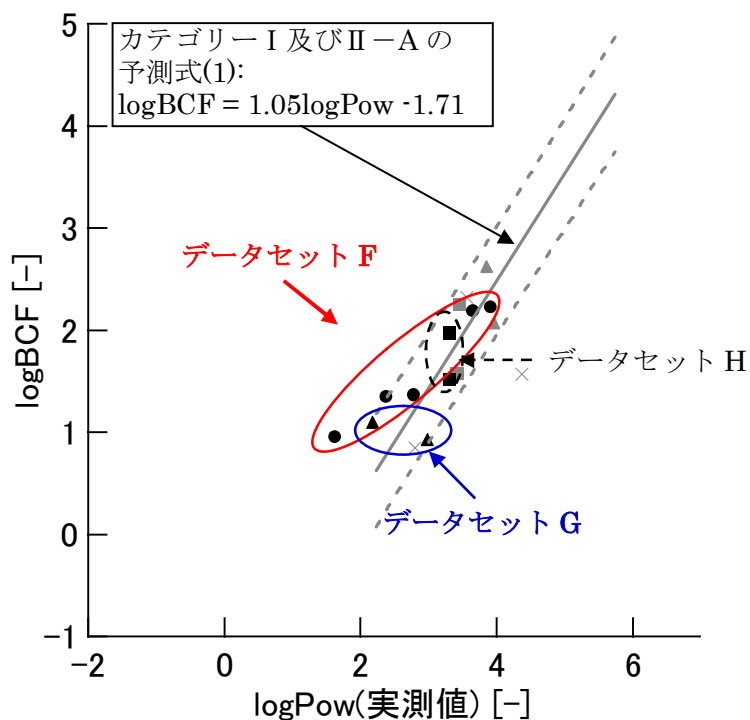


Fig.13b logPow(実測値) vs. logBCF プロット(イオン存在割合が10%未満かつ

$D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン 16 物質)

[●:ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つ物質(5 物質)、×:ジフェニルアミン骨格を持つ物質(3 物質)、
▲:複素環芳香族アミン(データセット G 2 物質)、△:複素環芳香族アミン(データセット G 以外の 2 物質)、
■:その他の骨格を持つ物質(データセット H 2 物質)、●:その他の骨格を持つ物質(データセット H 以外の 2 物質)、
---:予測式(1)の 95%信頼限界]

②-1. 「ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つアミン 5 物質」の生物濃縮挙動について

これらの 5 物質(データセット F、別添 2 の Table2-16)は、置換基に炭化水素基及びハロゲン基を持つ物質群で、類似な構造を持つ物質群である。また、これらの 5 物質は、 $1.62 \leq \log Pow(\text{実測値}) \leq 3.91$ または $2.18 \leq \log Pow(\text{計算値}) \leq 3.47$ の範囲で、logPow が増加すると logBCF も増加する傾向にあり、logPow が近い物質は同程度の生物濃縮性を示すことから、次ページの条件に当てはまる未試験の「ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つアミン」は、データセット F を用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験の「ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つアミン」の条件:]

[1]	基本骨格：ジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つ
[2]	置換基： R ¹ , R ² =(1)~(11)の置換基
[3]	イオン存在割合が 10%未満(pH-pKa>1)
[4]	1.62 ≤ logPow(実測値) ≤ 3.91 または 2.18 ≤ logPow(計算値) ≤ 3.47
[5]	Dmax ≤ 13.14 Å
基本骨格	

②-2. 「ジフェニルアミン骨格を持つアミン 4 物質」の生物濃縮挙動について

これらの 4 物質(No.7, 18, 47, 94) の分子構造の類似性を比較すると、ジフェニルアミン骨格にベンゼン環が結合した N-フェニル-1-ナフチルアミン骨格を持つ物質(No.7)やアミン以外の水素結合性ドナーを持つ物質(スルホンアミド基: No.47、ヒドロキシル基: No.94) が混ざっていることが分かる。また、 $2.80 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 4.37$ または $2.46 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 4.47$ 、 $0.85 \leq \log\text{BCF} \leq 3.15$ であることから、「ジフェニルアミン骨格を持つアミン」は、分子構造及び生物濃縮性が類似な類縁物質の数が少ないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

②-3. 「複素環芳香族アミン 5 物質」の生物濃縮挙動について

これらの 5 物質(No.15, 39, 41, 75, 90) の分子構造、物理化学的性状及び生物濃縮性を比較すると、トリアジン骨格を持つ 2 物質(No.75, 90、データセット G、別添 2 の Table2-17)は類似な構造を持つ物質かつ $2.18 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 2.98$ または $2.40 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 3.32$ 、 $0.91 \leq \log\text{BCF} \leq 1.08$ の範囲で、logBCF は 0.91~1.08 の範囲に分布し、同程度の生物濃縮性を示す。このことから、次ページの条件に当てはまる「トリアジン骨格を持つアミン」は、データセット G を用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験の「トリアジン骨格を持つアミン」の条件:]

[1]	基本骨格：トリアジン骨格を持つ物質
[2]	置換基： R=(1)~(11)の置換基
[3]	イオン存在割合が 10%未満(pH-pKa>1)
[4]	2.18 ≤ logPow(実測値) ≤ 2.98 または 2.40 ≤ logPow(計算値) ≤ 3.32
[5]	Dmax ≤ 13.66 Å
基本骨格	

また、トリアジン骨格以外の骨格を持つ複素環芳香族アミン 3 物質(No.15,39, 41,)は類似な構造を持たないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

②-4.「その他の骨格を持つアミン 5 物質」の生物濃縮挙動について

これらの 5 物質(No.20, 32, 45, 48, 132) の分子構造、物理化学的性状及び生物濃縮性を比較すると、アントラキノン骨格を持つアミン 2 物質(データセット H、別添 2 の Table2-18)は類似な構造を持つ物質かつ $\log Pow(\text{実測値})=3.31$ または $2.43 \leq \log Pow(\text{計算値}) \leq 3.53$ の範囲で、 $\log BCF$ は 1.53~1.98 の範囲に分布し、同程度の生物濃縮性を示す。このことから、次の条件に当てはまる未試験の「アントラキノン骨格を持つアミン」は、データセット H を用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験の「アントラキノン骨格を持つアミン」の条件:]

[1]	基本骨格：アントラキノン骨格を持つ物質
[2]	置換基：R=(1)~(11)の置換基
[3]	イオン存在割合が 10%未満($pH-pK_a > 1$)
[4]	$\log Pow(\text{実測値})=3.31$ または $2.43 \leq \log Pow(\text{計算値}) \leq 3.53$
[5]	$D_{max} \leq 12.72 \text{ \AA}$
基本骨格	

③イオン存在割合 $\geq 10\%$ かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミンの生物濃縮挙動について

イオン存在割合 $\geq 10\%$ かつ $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族 1 級または 2 級アミン 1 物質(No.106)は、類似な類縁物質がないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

5.5.3 脂肪族アルコール 12 物質の生物濃縮挙動について

物理化学的性状の類似な物質群に細分類するために、イオン存在割合=10%と $D_{max}=11 \text{ \AA}$ を閾値に用いて、カテゴリー II-B に該当する脂肪族アルコール 12 物質を次の 4 つの物質群に分類した(Table14)。① $D_{max} < 11 \text{ \AA}$ の脂肪族アルコール 8 物質及び② $D_{max} \geq 11 \text{ \AA}$ の脂肪族アルコール 4 物質の物質リストを別添 2 の Table2-19、2-20 に示す。また、カテゴリー II-B

に該当する脂肪族アルコール 12 物質における細分類結果と Read-across を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群の例の関係を Table15 に示す。

Table14 脂肪族アルコール 12 物質の物理化学的性状(イオン存在割合、Dmax)による細分類の結果

	物質群	該当物質数 (logPow が実測されている物質数)
①	イオン存在割合<10%かつ Dmax<11 Å	8 物質(6 物質)
②	イオン存在割合<10%かつ Dmax ≥ 11 Å	4 物質(2 物質)
③	イオン存在割合 ≥ 10%かつ Dmax<11 Å	0 物質(0 物質)
④	イオン存在割合 ≥ 10%かつ Dmax ≥ 11 Å	0 物質(0 物質)

合計 12 物質(8 物質)

Table15 脂肪族アルコール 12 物質の物理化学的性状(イオン存在割合、Dmax)及び分子構造による細分類結果と Read-across を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群の例の関係

Table14 の結果		基本骨格による細分類結果とデータセットに用いた 144 物質における該当物質数		適用範囲
		Read-across で予測可能と 判断した物質群の例		
12 物 質 (8)	①に該当する 8 物質(6)	脂肪族アルコール 8 物質(6)	(シ)鎖状脂肪族アルコール 8 物質(6)	p.50 参照
	②に該当 4 物質(2)	脂肪族アルコール 4 物質(2)	—	—

※括弧内の数字は logPow が実測されている物質数

Table14 より、カテゴリー II-B に該当する脂肪族アルコール 12 物質は、全てイオン存在割合が 10%未満であるため、化学物質の生体への取り込み速度における化学物質の解離の影響はないと考えられる。また、脂肪族アルコール 12 物質(logPow が実測されている物質は 8 物質)の logPow(計算値)または logPow(実測値)と logBCF とのプロットを Fig.14a、14b に示す。

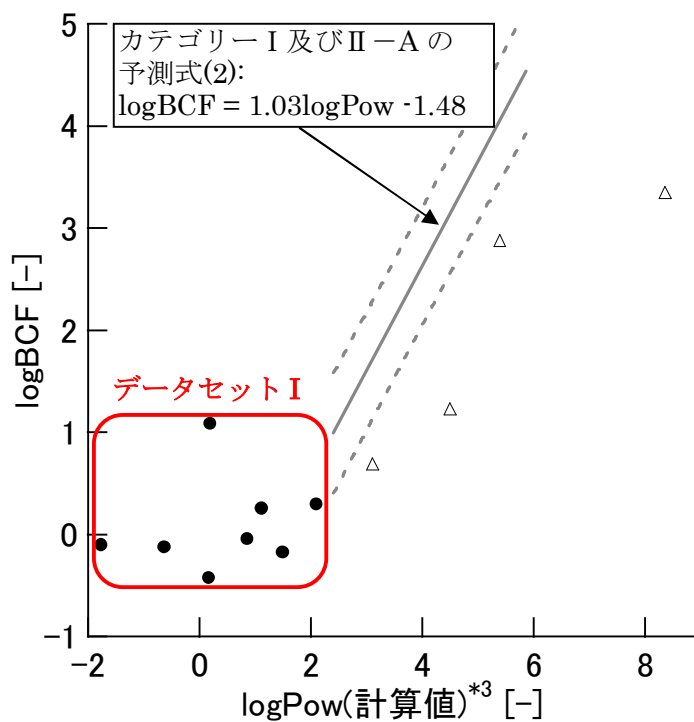


Fig.14a $\log Pow(\text{計算値})$ vs. $\log BCF$ プロット(脂肪酸アルコール 12 物質)

●:①カテゴリー II-B に該当する $D_{\max} < 11 \text{ \AA}$ の脂肪酸アルコール(8 物質)、
 △:②カテゴリー II-B に該当する $D_{\max} \geq 11 \text{ \AA}$ の脂肪酸アルコール(4 物質)、
 ---: 予測式(2)の 95%信頼限界

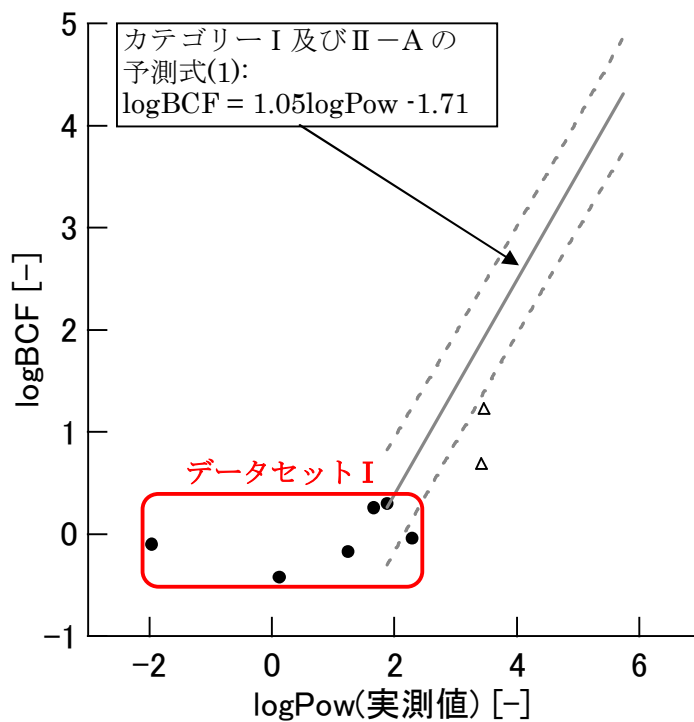


Fig.14b $\log Pow(\text{実測値})$ vs. $\log BCF$ プロット(脂肪酸アルコール 8 物質)

●:①カテゴリー II-B に該当する $D_{\max} < 11 \text{ \AA}$ の脂肪酸アルコール(6 物質)、
 △:②カテゴリー II-B に該当する $D_{\max} \geq 11 \text{ \AA}$ の脂肪酸アルコール(2 物質)
 ---: 予測式(1)の 95%信頼限界

①イオン存在割合<10%かつ Dmax<11 Åの脂肪族アルコール 8 物質の生物濃縮挙動について

これらの 8 物質(データセット I、別添 2 の Table2-19)は、全て鎖状脂肪族アルコールで、該当物質の最大炭素数は 8、置換基は鎖状炭化水素基、ハロゲン基、ヒドロキシル基で、類似な構造を持つ物質である。また、これらの 8 物質は、 $-1.96 \leq \log Pow(\text{実測値}) \leq 2.29$ 、 $-1.77 \leq \log Pow(\text{計算値}) \leq 2.36$ の範囲で、logBCF が全て 1.09 以下の同程度の生物濃縮性を示すことから、次の条件に当てはまる未試験の「脂肪族アルコール」はデータセット I を類縁物質に用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験の「鎖状脂肪族アルコール」の条件:]

[1]	基本骨格：鎖状脂肪族アルコール
[2]	置換基：R ¹ , R ² , R ³ , = (1)~(11)の置換基(4. 参照) R ⁴ = (1)~(11)の置換基及びヒドロキシル基
[3]	イオン存在割合が 10%未満(pH-pKa<1)
[4]	logPow(実測値) ≤ 2.29 または logPow(計算値) ≤ 2.09
[5]	Dmax<11 Å
基本骨格	

②イオン存在割合<10%かつ Dmax ≥ 11 Åの脂肪族アルコール 4 物質の生物濃縮挙動について

これらの 4 物質(別添 2 の Table2-20)において、パーフルオロアルコール 2 物質(No.6、67)は、類似な分子構造を持つ物質である。しかしながら、類縁物質が 2 物質と少なく、両者の生物濃縮性(logBCF : 3.33(No.67)、1.21(No.6)) が大きく異なることから、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。また、パーフルオロアルコール以外の Dmax ≥ 11 Å の脂肪族アルコール 2 物質についても同様に分子構造が類似な類縁物質が少ないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

5.5.4 芳香族アルコール 7 物質の生物濃縮挙動について

物理化学的性状の類似な物質群に細分類するために、イオン存在割合=10%と Dmax=11 Å を閾値に用いて、カテゴリー II - B に該当する芳香族アルコール 7 物質を 4 つの物質群に分類した(Table16)。①Dmax<11 Å の芳香族アルコール 3 物質及び②Dmax ≥ 11 Å の芳香族アルコール 4 物質の物質リストを別添 2 の Table2-21、2-22 に示す。また、カテゴリー II - B に該当する芳香族アルコール 12 物質における細分類結果と Read-across を用いて生物濃縮性が予測可能と判断した物質群の例の関係を Table17 に示す。

Table16 芳香族アルコール 7 物質の物理化学的性状(イオン存在割合、Dmax)による
 細分類の結果

	物質群	該当物質数 (logPow が実測されている物質数)
①	イオン存在割合<10%かつ Dmax<11 Å	3 物質(3 物質)
②	イオン存在割合<10%かつ Dmax≥11 Å	4 物質(3 物質)
③	イオン存在割合≥10%かつ Dmax<11 Å	0 物質(0 物質)
④	イオン存在割合≥10%かつ Dmax≥11 Å	0 物質(0 物質)

合計 7 物質(6 物質)

Table17 芳香族アルコール 7 物質の物理化学的性状(イオン存在割合、Dmax)及び
 分子構造による細分類結果と Read-across を用いて生物濃縮性が予測可能と
 判断した物質群の例の関係

Table16 の結果		基本骨格による細分類結果とデータセットに用いた 144 物質における該当物質数	Read-across で予測可能と 判断した物質群の例	適用範囲
7 物 質 (8)	①に該当する 3 物質(3)	芳香族アルコール 3 物質(3)	(ス)芳香族アルコール 3 物質(3)	p.53 参照
	②に該当する 4 物質(3)	芳香族アルコール 4 物質(3)	—	—

※括弧内の数字は logPow が実測されている物質数

Table16 より、カテゴリー II-B に該当する芳香族アルコール 7 物質は、全てイオン存在割合が 10%未満であるため、化学物質の生体への取り込み速度における化学物質の解離の影響はないと考えられる。

カテゴリー II-B に該当する芳香族アルコール 7 物質(logPow が実測されている物質は 6 物質)の logPow(計算値)または logPow(実測値)と logBCF とのプロットを Fig.15a、15b に示す。

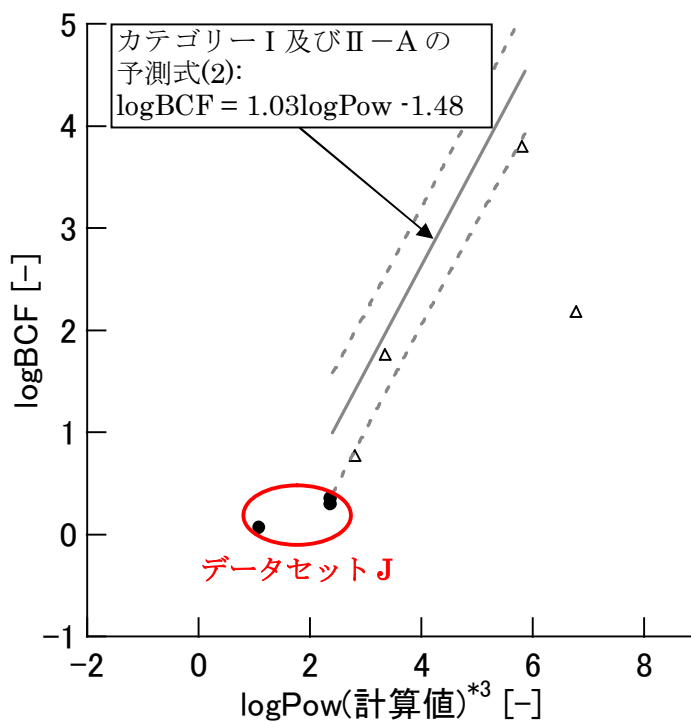


Fig.15a logPow(計算値) vs. logBCF プロット(芳香族アルコール 7 物質)

●: カテゴリー II-B に該当する $D_{\max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族アルコール(3 物質)、
 △: カテゴリー II-B に該当する $D_{\max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族アルコール(4 物質)
 - -: 予測式(2)の 95%信頼限界]

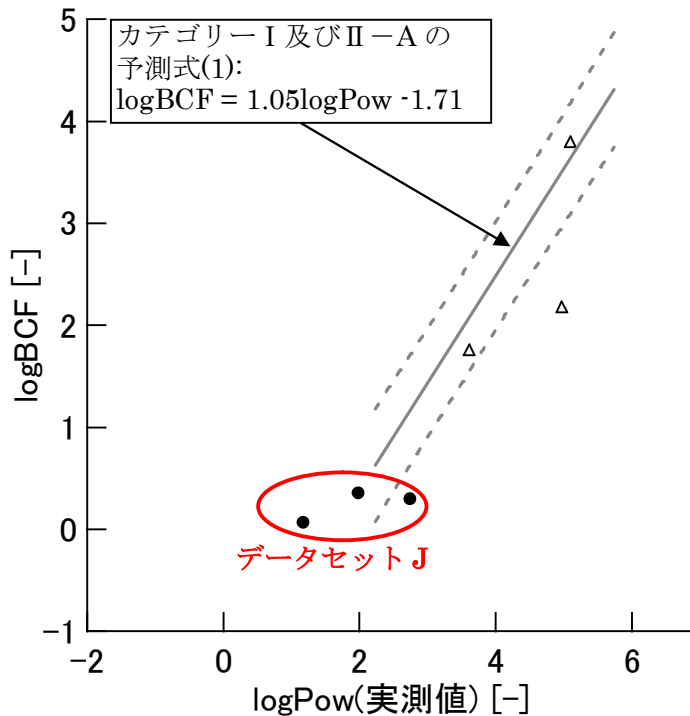


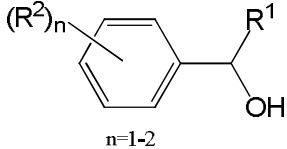
Fig.15b logPow(実測値) vs. logBCF プロット(芳香族アルコール 6 物質)

●: カテゴリー II-B に該当する $D_{\max} < 11 \text{ \AA}$ の芳香族アルコール(3 物質)、
 △: カテゴリー II-B に該当する $D_{\max} \geq 11 \text{ \AA}$ の芳香族アルコール(3 物質)、
 - -: 予測式(1)の 95%信頼限界]

①イオン存在割合<10%かつ Dmax<11 Åの芳香族アルコール 3 物質の生物濃縮挙動について

これらの 3 物質(データセット J、別添 2 の Table2-21)は、基本骨格がベンジルアルコールかつベンゼン環にハロゲン基が 1 または 2 置換した物質で、類似な構造を持つ物質である。また、これらの 3 物質は、 $1.17 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 2.74$ 、 $1.08 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 2.36$ の範囲で、 $\log\text{BCF}$ が全て 0.36 以下と同程度の生物濃縮性を示す。以上のことから、次ページの条件に当てはまる未試験の芳香族アルコールは、データセット J を用いた Read-across により、生物濃縮性を予測することが可能である。

[Read-across により生物濃縮性が予測可能な未試験芳香族アルコールの条件:]

[1] 基本骨格：ベンジルアルコールかつ ベンゼン 1 または 2 置換体	<p>基本骨格</p> 
[2] 置換基：R ¹ = (1)~(11)の置換基 (4. 参照)または ヒドロキシル基 R ² = (1)~(11)の置換基	
[3] イオン存在割合が 10%未満 (pH-pKa<1)	
[4] $1.17 \leq \log\text{Pow}(\text{実測値}) \leq 2.74$ または $1.08 \leq \log\text{Pow}(\text{計算値}) \leq 2.36$	
[5] Dmax<11 Å	

②イオン存在割合<10%かつ Dmax≥11 Åの芳香族アルコール 4 物質の生物濃縮挙動について

これらの 4 物質(別添 2 の Table2-22)の中で 2 物質(No.3、24)は、基本骨格がジフェニルメタノール骨格を持つ物質であるが、置換基または物理化学的性状(logPow)が大きく異なり、類似な構造を持つ類縁物質が少ない。また、ジフェニルメタノール骨格以外の分子構造を持つ Dmax≥11 Åの芳香族アルコール 2 物質においても、分子構造及び物理化学的性状(logPow)が大きく異なる。以上のことから、カテゴリー II-B に該当する Dmax≥11 Åの芳香族アルコール 4 物質は構造が類似な類縁物質が少ないため、個別に Read-across による定性的な予測を行うこととする。

6. カテゴリー II-B に該当する未点検既存化学物質の生物濃縮性予測例

カテゴリー II-B の定義に該当する未点検既存化学物質の中で、o-tert-ブチルフェノール(o-TBP)の Read-across を用いた生物濃縮性予測例を示す。

①logPow を記述子とした予測式から算出される logBCFmax(logBCF の最大値)を用いた定性的な生物濃縮性予測

o-TBP の logPow(計算値)は 3.42 である。この値を予測式(2)に代入すると、

$$\log BCF(\text{予測値}) = 1.03 \times 3.42 - 1.48 = 2.043 \dots \doteq 2.04$$

logPow(計算値)=x₂ とおくと、予測対象物質の logBCF(予測値)の 95%信頼限界は次式(4)より算出される。

$$[95\% \text{信頼限界}] = \sqrt{Ve \left\{ 1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_2 - \bar{x}_2)^2}{S_{xx}} \right\}} \times t(\text{自由度}, 0.05) \quad (4)$$

ここで、Ve (予測式(2)の誤差分散) = 0.081、n (データ数) = 54、S_{xx} (トレーニングセットの x₁ の標準偏差の平方和) = 32.024、 \bar{x}_1 (x₁ の平均値) = 3.77、t 分布表より (α = 0.05、自由度 53、

両側)のとき $t=2.006$ である。これら全ての値を式(4)に代入すると、 $x_i=3.42$ のときの 95%信頼限界は、

$$[95\% \text{信頼限界}] = \sqrt{0.081 \times \left\{ 1 + \frac{1}{54} + \frac{(3.42 - 3.77)^2}{32.024} \right\}} \times 2.006 = 0.577 \dots = 0.58$$

よって、 σ -TBP の $\log BCF_{\max}$ は次のとおり算出される。

$$\log BCF_{\max} = 2.04 + 0.58 = 2.62$$

②Read-across(類推)による $\log BCF$ の定量的な生物濃縮性予測

σ -TBP ($\log Pow$ (実測値)=3.31、 $\log Pow$ (計算値)*³=3.42、 pKa (実測値)=11.37、 pKa (計算値)=11.34、 D_{\max} *⁴=9.4Å)の Read-across に用いる類縁物質は、①分子構造の類似性(基本骨格、置換基)、②物理化学的性状($\log Pow$ 、 pKa 、 D_{\max})の両方の観点から選択する必要がある。そこで、トレーニングセット(144 物質)の中から、以下の条件に基づいて類縁物質の選択を行った。

- ① 単環フェノールかつ置換している-OH 基が 1 つの物質
- ② $\log Pow$ (計算値)*³が 3.42(予測対象物質の $\log Pow$ の実測値) ± 1.0 の物質
- ③ イオン存在割合が 10%未満($pH^{*8} - pKa^{*9} < 1$)の物質
- ④ $D_{\max} < 11 \text{Å}$ の物質

①-④の条件を踏まえ、トレーニングセット(144 物質)から 10 物質が σ -TBP の類縁物質とした(Table18)。

これらの 10 物質の $\log BCF$ の平均値を算出し、 σ -TBP の $\log BCF$ (予測値)とする。

$$\log BCF(\text{予測値}) = \frac{(1.80 + 1.71 + 1.63 + 1.43 + 1.40 + 1.27 + 1.09 + 1.09 + 0.88 + 0.83)}{10} \\ = 1.31$$

また、 t 分布表より($\alpha=0.05$ 、自由度 9、両側)のとき $t=2.262$ 、10 物質の $\log BCF$ の標準誤差(S.E.)= 0.11 より、 $\log BCF$ (予測値)の 95%信頼限界は、

$$[95\% \text{信頼限界}] = 0.11 \times 2.262 = 0.24$$

よって、Read-across から算出される σ -TBP の $\log BCF$ (予測値)は、次のとおりである。

$$\log BCF(\text{予測値}) = 1.31 \pm 0.24$$

* 8 カテゴリー II -B に該当する物質の中で濃縮度試験における pH が実測されている 59 物質の試験水の平均値(7.77)を使用。

* 9 pKa が実測されている場合には、実測値を使用。 pKa が実測されていない場合には、ACD pKa DB ver.12.0 を用いて算出。

σ -TBP の生物濃縮性の評価

σ -TBP の $\log Pow$ を記述子とした予測式(2)から算出される $\log BCF_{\max}$ と Read-across による $\log BCF$ の予測結果及び類縁物質 10 物質の $\log Pow$ と $\log BCF$ のプロットを Fig.16 に示す。 σ -TBP の生物濃縮性は、予測式(2)から算出される $\log BCF_{\max}=2.62$ から「 $\log BCF$ は 2.62 未満」、Read-across(類推)を用いた予測結果から $\log BCF = 1.31 \pm 0.24$ と予測された。

logBCFmax の値及び Read-across(類推)から算出される logBCF(予測値)の最大値が 3 を超えないことから、この物質の生物濃縮性は「高濃縮性ではない」と判断する。

Table18 *o-tert*-ブチルフェノールと選択された類縁物質(10 物質)

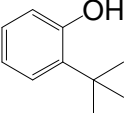
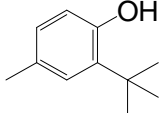
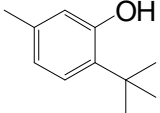
No.	評価対象物質	1	2
CAS No.	88-18-6	2409-55-4	88-60-8
物質名	<i>o-tert</i> -ブチルフェノール	2- <i>tert</i> -ブチル-4-メチルフェノール	2- <i>tert</i> -ブチル-5-メチルフェノール
分子構造			
logBCF	実測値	-	1.80
logPow	実測値	3.31	-
	計算値*3	3.42	3.97
分子量	150.2	164.2	164.2
沸点 [°C]	-	237.0	-
対水溶解性[ppm]	-	431	420
Dmax*4 [Å]	9.4	10.0	10.4
pKa	実測値	11.37	11.72
	計算値*7	11.34	11.64
pH*8-pKa(計算値)*7 [-]	-3.57	-3.87	-3.68

Table18 *o-tert*-ブチルフェノールと選択された類縁物質(10 物質) [続き]

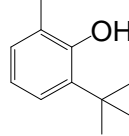
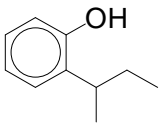
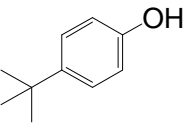
No.	3	4	5
CAS No.	2219-82-1	89-72-5	98-54-4
物質名	2- <i>tert</i> -ブチル-6-メチルフェノール	2- <i>sec</i> -ブチルフェノール	<i>p-tert</i> -ブチルフェノール
分子構造			
logBCF	実測値	1.63	1.43
logPow	実測値	-	3.49
	計算値*3	3.97	3.46
分子量	164.2	150.2	150.2
沸点 [°C]	230.0	228.0	237.0
対水溶解性[ppm]	250	1500	610
Dmax*4 [Å]	10.2	10.4	10.2
pKa	実測値	-	10.68
	計算値*7	11.69	10.36
pH*8-pKa(計算値)*7 [-]	-3.92	-2.59	-2.36

Table18 *o-tert*-ブチルフェノールと選択された類縁物質(10 物質) [続き]

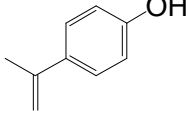
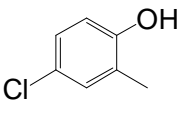
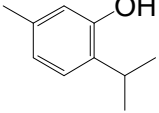
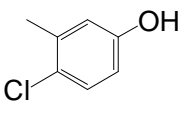
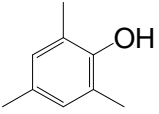
No.		6	7	8
CAS No.		4286-23-1	1570-64-5	89-83-8
物質名		4-イソプロペニルフェノール	4-クロロ- <i>o</i> -クレゾール	チモール
分子構造				
logBCF	実測値	1.27	1.09	1.09
logPow	実測値	2.90	3.12	3.30
	計算値*3	2.96	2.70	3.52
分子量		134.2	142.6	150.2
沸点 [°C]		-	223.0	232.5
対水溶解性[ppm]		1390	1000	1000
Dmax*4 [Å]		10.1	9.0	10.4
pKa	実測値	10.49	9.66	10.49
	計算値*7	9.80	9.87	10.59
pH*8-pKa(計算値)*7 [-]		-2.03	-2.10	-2.82

Table18 *o-tert*-ブチルフェノールと選択された類縁物質(10 物質) [続き]

No.		9	10
CAS No.		59-50-7	527-60-6
物質名		4-クロロ- <i>m</i> -クレゾール	2, 4, 6-トリメチルフェノール
分子構造			
logBCF	実測値	0.88	0.83
logPow	実測値	3.10	-
	計算値*3	2.70	3.15
分子量		142.6	136.2
沸点 [°C]		235.0	220.0
対水溶解性[ppm]		1000	1000
Dmax*4 [Å]		9.0	8.9
pKa	実測値	9.47	10.91
	計算値*7	9.63	10.97
pH*8-pKa(計算値)*7 [-]		-1.86	-3.20

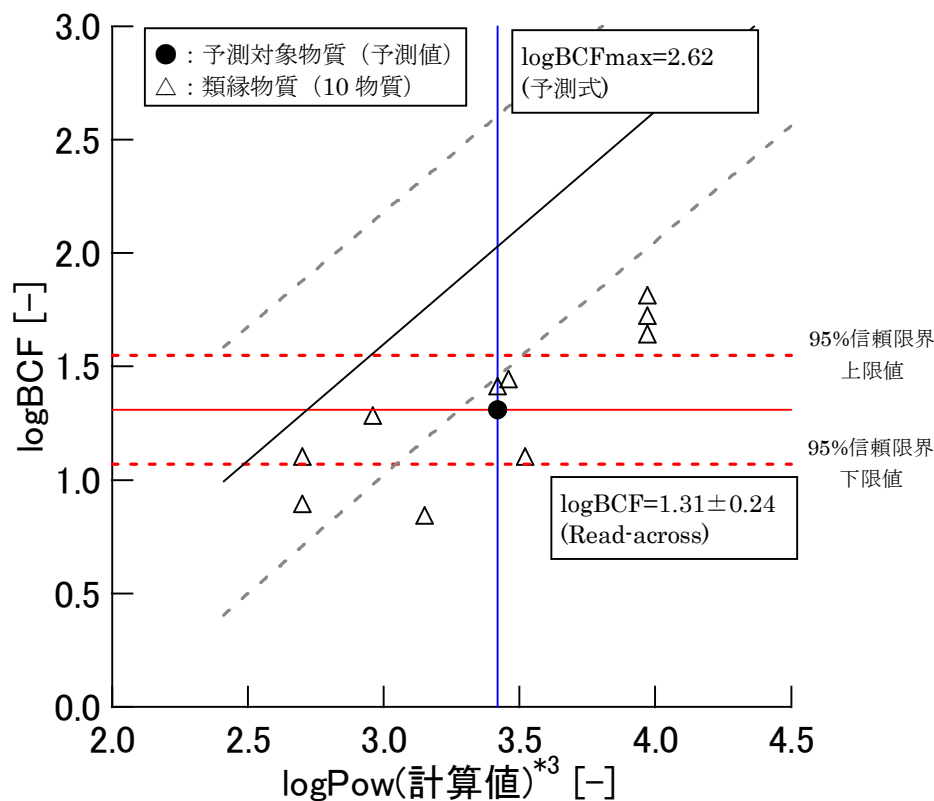


Fig.16 o-TBP の Read-across による logBCF の予測結果

7. 既存の構造活性相関ソフトウェアによる予測結果

カテゴリーII-B のトレーニングセット(144 物質)において、既存の構造活性相関ソフトウェア(3モデル、8. 参照)を用いて生物濃縮性予測を行った。BCFBAF 及び Baseline モデルにおいては全 144 物質、CERI モデルでは 106 物質に対して予測が行われた。logBCF の予測値と実測値のプロットを Fig.17-20 に示す。Fig.における R^2 、S.E.は、それぞれ決定係数及び標準誤差の値である。

BCFBAF では、120 物質に対して予測式($\log BCF = 0.6598 \log Pow - 0.333$)、5 物質に対して予測式($\log BCF = -0.49 \log Kow + 7.554$)、17 物質に対して $\log BCF = 0.50 (\log Pow < 1)$ 、2 物質に対して $\log BCF = 1.00$ (芳香族アゾ化合物)を用いて予測を行った(Fig.17、Table19)。予測結果の中で、予測値の 95% 信頼区間外 ($[\text{予測値}] \pm 1.18$) の物質は 8 物質 (No.4,24,27,50,54,67,134,142)で、フォールスネガティブ(予測値<実測値)に大きく外れた(95% 信頼限界上限を超えた)のは 1 物質 (No.4)のみであった。No.4 は $\log BCF$ (実測値)=3.63 であるが、BCFBAF では「芳香族アゾ化合物」に該当して定性的に予測($\log BCF = 1.00$)され、予測結果が大きく外れている。

CERI モデルでは 106 物質に対して予測式($\log BCF = 0.76 \log Pow - 0.76$)を用いた予測、27 物質に対して定性的予測($\log BCF < 3$)が行われ、11 物質が予測困難($\log Pow \geq 7$ (6 物質)、ケイ素化合物(3 物質)、フッ素化合物(2 物質))であった(Fig.18、Table20)。106 物質における予測結果の中で、予測値の 95% 信頼区間外 ($[\text{予測値}] \pm 0.87$) の物質は 11 物質 (No.12,17,24,34,40,47,50,76,86,106,142)で、フォールスネガティブ(予測値<実測値)に大きく外れたのは 1 物質 (No.106)のみであった。No.106 は $\log BCF$ (実測値)<1 の物質であるため、餌

や魚体表面に吸着した物質等による logBCF(実測値)の実測誤差が大きいことが想定される。そのため、このことが原因で予測が外れた可能性がある。

Baseline モデルでは、全 144 物質に対して予測が行われた(Fig.19)。144 物質における予測結果の中で、予測値の 95%信頼区間外([予測値]±1.30)の物質は 5 物質(No.2,4,10,17,67)で、フォールスネガティブ(予測値<実測値)に大きく外れたのは 3 物質(No.2,4,10)であった。Baseline モデルは、いくつかの物質において生体内における代謝の影響を考慮した予測を行う。この代謝の予測には、ラットの代謝データが用いられているが、魚類の代謝とは反応または反応速度に種差があることが予想される。この 3 物質(No.2,4,10)については、予測結果から代謝による影響が約 92%~100%と見積もられており、代謝の過大評価が原因でフォールスネガティブに外れた可能性がある。

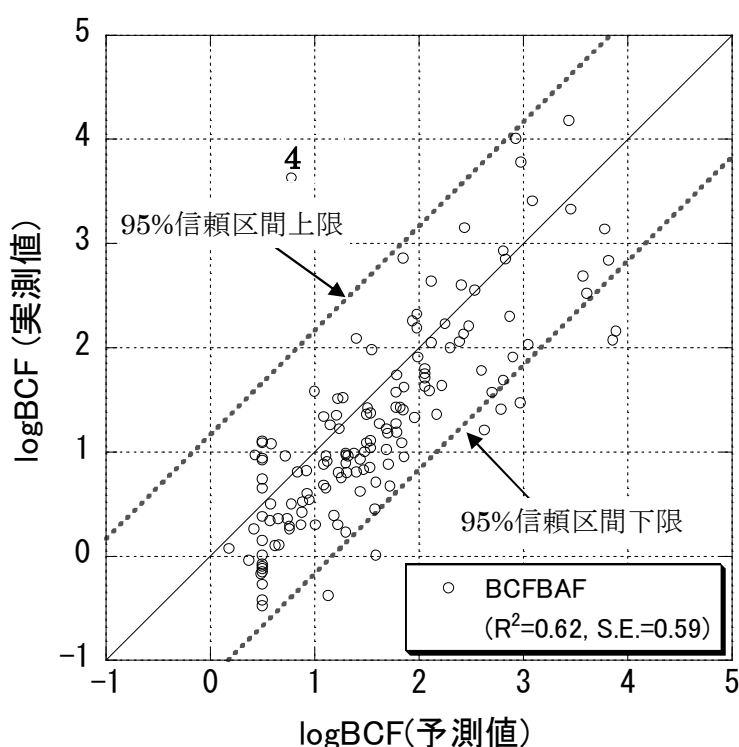


Fig.17 BCFBAF による予測結果(144 物質)

Table19 BCFBAF による定性予測及び定量予測の方法及び該当物質数

該当する定性予測及び定量予測の方法	該当物質数
$\text{Log BCF} = 0.6598 \log\text{Pow} - 0.333 + \text{Correction}$	120物質
$\text{Log BCF} = -0.49 \log\text{Pow} + 7.554 + \text{Correction}$	5物質(2,6,8,27,54)
$\text{Log BCF} = 0.50 (\log\text{Pow} < 1)$	17物質 (71,72,87,89,102,106,117,128,132, 133,136,137,138,139,141,143,144)
$\text{Log BCF} = 1.00 (\text{Aromatic Azo Specification})$	2物質(4,45)

※括弧内の数字は該当する物質の物質No.

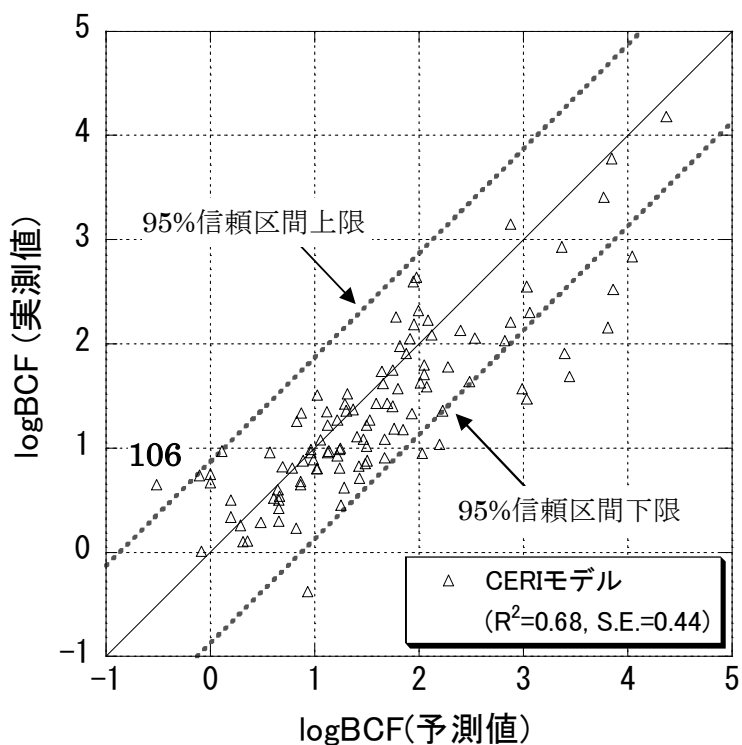


Fig.18 CERI モデルによる予測結果(106 物質)

Table20 CERI モデルによる定性予測及び定量予測の方法及び該当物質数

該当する定性予測及び定量予測の方法	該当物質数
$\log BCF = 0.76 \log P - 0.76$	106物質
定性予測 (BCF1000倍未満)	27物質 (No.10,45,71,72,87,89,101,105,116,117,118, 119,121,123,128,131,133,134,135,136,137, 138,139,140,141,143,144)
予測困難 ($\log P \geq 7$)	6物質(No.2,4,8,13,27,31)
予測困難 (フッ素化合物)	3物質(No.6,67,125)
予測困難 (ケイ素化合物)	2物質(No.11,54)

※括弧内の数字は該当する物質の物質No.

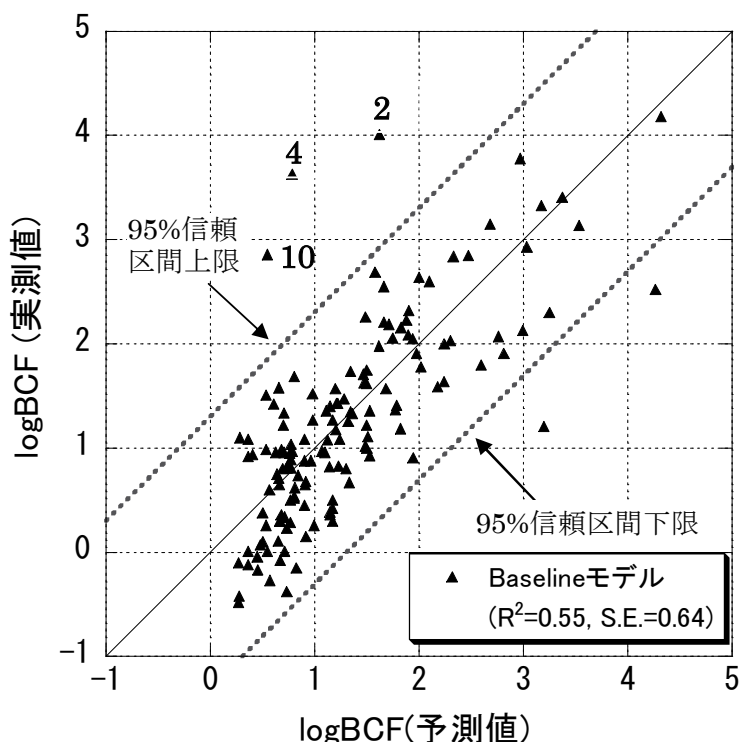


Fig.19 Baseline モデルによる予測結果(144 物質)

8. 解析に使用したデータ及びソフトウェア

8-1. 本報告書で用いた物質及び濃縮度試験データ

(1)ベースデータセット:

化審法既存点検による濃縮度試験結果が公表されている全 783 物質(平成 20 年 8 月 12 日まで²⁾)の中で、以下の条件を満たす 371 物質を解析データに使用した。

- 1) 有機低分子量かつ濃縮度試験が化合物単体で行われているもの(662 物質)
- 2) 対水溶解度が明確に測定されており、対水溶解度より低い濃度で濃縮度試験がなされたもの(417 物質)
- 3) 測定濃度が検出限界以下でなく、BCF 値が明確に測定されており、対象物質のみの濃縮性が測定されているもの(各物質の BCF 値には、最低濃度区の後半 3 週における魚 2 匹(6 点)の濃縮倍率の平均値を使用した。測定結果に【検出限界以下】の記述がある場合には、その上の濃度区のデータを解析に用いた)

(2)予測例に用いた未点検の化審法既存化学物質

濃縮度試験が未実施の第 2 類から第 5 類に属する化審法既存化学物質で、平成 19 年度実績における年間の製造・輸入量²⁸⁾の合計が 10t 以上と確認された物質のうち、化学構造が特定可能な物質を用いた。

8-2. 本報告書で使用したソフトウェア

- (1) logPow(計算値)の算出: KOWWIN ver.1.67 (US EPA)
- (2) 分子を球に入れたとき最小となる直径(Dmax)の算出:

Database Manager 4.3 ver.1.3 (Laboratory of Mathematical Chemistry)

計算条件: Conversion mode: Automated OASIS

Conformer generation: Rapid

Calculation method: AM1

(3) pKa(計算値)の算出: ACD pKa DB ver.12.0

(4) μ^2 (双極子モーメントの2乗)の算出:

Database Manager 4.3 ver.1.3 (Laboratory of Mathematical Chemistry)

(5) MR(モル屈折率)、Hy_acc(水素結合性アクセプターの数)及び Hy_don(水素結合性ドナー)の数の算出:

MOE2009.10 (Chemical Computing Group Inc.)

(6) データ解析及びグラフ描画:

Igor Pro ver.5.05 (Wave Metrics)

Kaleida Ver.3.6 (Synergy Software)

OECD QSAR Toolbox ver2.0(Laboratory of Mathematical Chemistry)

エクセル統計 2008(株式会社社会情報サービス)

(7) 構造活性相関ソフトウェア:

BCFBAF ver.3.00 (US EPA)

化学物質特性予測システム ver.2.18[CERI モデル] ((財)化学物質評価研究機構)

Catabol ver.5.100[Baseline モデル] (Laboratory of Mathematical Chemistry)

9. 参考文献

- 1) OECD 原則に基づく構造活性相関モデルのバリデーション
BIOWIN5: http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/biowin5.pdf
生分解性予測システム: http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/ceri.pdf
Catabol: http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/catabol.pdf
- 2) 化学物質総合情報システム(CHRIP): <http://www.safe.nite.go.jp/japan/db.html>
- 3) カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書(カテゴリー I):
[http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/category_approach\[1\].pdf](http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/category_approach[1].pdf)
- 4) カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書(カテゴリー II-A):
[http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/category_approach\[2A\].pdf](http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/category_approach[2A].pdf)
- 5) 古賀直文, 生体膜と膜透過, 南江堂, 46-65(1964)
- 6) Lipinski CA., Advanced Drug Delivery Reviews, **23(1-3)**, 3-25(1997).
- 7) Hayton WL., *Environmental Toxicology and Chemistry*, **9(2)**, 151-157(1990).
- 8) Isaia J., *The Journal of Physiology*, **326(1)**, 297-307(1982).
- 9) 構造活性相関懇話会編, 薬物の構造活性相関 ドラッグデザインと作用機作研究への指針, 南江堂, 365-371(1979).
- 10) 加藤隆一, 臨床薬物動態学 改訂第3版, 南江堂, 5-8(2003).
- 11) M. CRAIG BARBER, *Environmental Toxicology and Chemistry*, **22(9)**, 1963-1992 (2003).

- 12) 若林明子, 化学物質と生態毒性 改訂版, 丸善, 193-196(2003).
- 13) Israelachvili J. N., 分子間力と表面力 第2版, 朝倉書店, 393-400(1996).
- 14) 西尾元宏, 有機化学のための分子間力入門, 16-22(2009).
- 15) 木下實ほか訳, ベッカー 一般化学 上, 300(1983).
- 16) Nishihara T., Saito S., Matsuo M., *Pharmaceutical Society of Japan*, **39**, 494-508(1993).
- 17) Akamatsu M., Fujikawa M., *Chemistry & Biodiversity*, **6**(11), 1845-1866(2009).
- 18) Lipinski C. A., Lombardo F., *Advanced Drug Delivery Reviews*, **23**(1-3), 3-25(1997).
- 19) OECD Quantitative Structure-Activity Relationships [(Q)SARs] Project :
http://www.oecd.org/document/23/0,3343,en_2649_34365_33957015_1_1_1_1,00.html
- 20) http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_r1_1_en.pdf?vers=20_08_08
- 21) Dimitrov SD, *QSAR Combinatorial Sci.*, **22**, 58-68(2003)
- 22) Sakuratani Y, *J. Environ. Biol.*, **29**, 89-92(2008).
- 23) Chessells M., *Ecotoxicology and environmental safety*, **23**(2), 260-273 (1992)
- 24) Saarikoski J., Lindstrom R., *Ecotoxicol Environ. Saf.*, **11**(2), 1158-73 (1986).
- 25) Matsuo M., *Chemosphere*, **9**, 409(1980).
- 26) Matsuo M., *Chemosphere*, **10**, 1073(1981).
- 27) Matsuo M., *Chemosphere*, **9**, 61(1980).
- 28) 経済産業省 HP(化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成19年度実績)結果報告(確報)) :
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/kakuhou19.html

1. 化学物質の魚体中への取り込みと排出の考え方¹⁶⁾

1.1 速度論的解釈

一般的な化学物質の魚類における取り込みと排出は、基本的に受動拡散によって起こる。ここで、魚類における水中の化学物質の取り込みと排出の速度定数を K_1 、 K_2 、時間を t とおき、生物濃縮の過程をコンパートメントモデル(Fig.1 の左図)で表現すると、水中の化学物質濃度(C_w)と魚体中の化学物質濃度(C_f)は、次の速度式で表現される。

$$\frac{dC_w}{dt} = K_2 \cdot C_f - K_1 \cdot C_w \quad (1)$$

$$\frac{dC_f}{dt} = K_1 \cdot C_w - K_2 \cdot C_f \quad (2)$$

$t=0$ のとき $C_f=0$ より、(2)式を積分して整理すると、(3)式が与えられる。

$$C_f = \frac{K_1}{K_2} \cdot C_w [1 - \exp(-K_2 t)] \quad (3)$$

$t=\infty$ のとき、(4)式が成立することから、 $BCF=(C_f / C_w)$ が取り込みと排出の速度定数の比として表現されることがわかる。

$$\frac{K_1}{K_2} = \frac{C_f}{C_w} = BCF \quad (4)$$

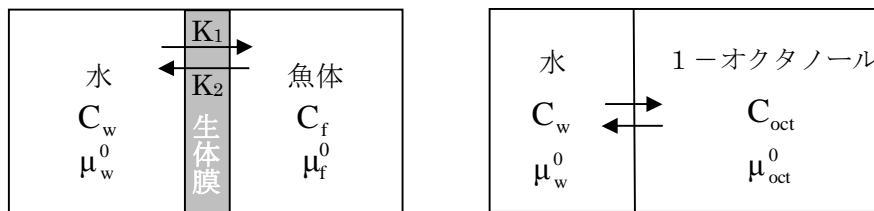


Fig.1 生物濃縮過程における水-魚体中と1-オクタノール中の化学物質の平衡(模式図)

1.2 熱力学的解釈

化学物質の魚類における取り込みと排出に伴う熱力学的な変化を考えると、 $BCF=(C_f / C_w)$ は化学物質の水中における標準化学ポテンシャル(μ_w^0)と魚体中における標準化学ポテンシャル(μ_f^0)の差として考えることができる(Fig.1 の左図)。

$$\mu_f^0 - \mu_w^0 = -RT \cdot \ln\left(\frac{C_f}{C_w}\right) \quad (5)$$

$$= -2.303 \cdot RT \cdot \log BCF \quad (6)$$

ここで R は気体定数、 T は絶対温度である。

2. 化学物質の生物濃縮性(logBCF)とlogPowの関係¹⁶⁾

化学物質の疎水性を計る指標の一つとして用いられる1-オクタノール/水分配係数(Pow)^{*2}は、1-オクタノール中の標準化学ポテンシャル(μ_{oct}^0)と μ_w^0 の差として考えることができ、(7)式が成り立つ(Fig.1 の右図)。

$$\mu_{\text{oct}}^0 - \mu_{\text{w}}^0 = -RT \cdot \ln \text{Pow} \quad (7)$$

$$= -2.303 \cdot RT \cdot \log \text{Pow} \quad (8)$$

よって、 $\mu_{\text{oct}}^0 \propto \mu_{\text{f}}^0$ のとき、(6)、(8)から次式が成立する。

$$\log \text{BCF} = a \cdot \log \text{Pow} - b \quad (9)$$

ここで、 a 、 b は任意の定数である。

このように化学物質の 1-オクタノール中における標準化学ポテンシャル(μ_{oct}^0)と魚体中における標準化学ポテンシャル(μ_{f}^0)が近似または比例関係($\mu_{\text{oct}}^0 \propto \mu_{\text{f}}^0$)を示す場合に、 $\log \text{BCF}$ と $\log \text{Pow}$ との間に直線関係が成り立つ。 μ_{oct}^0 と μ_{f}^0 の比例関係からの逸脱は、化学物質と 1-オクタノールまたは魚体中の生体分子(脂肪、リン脂質など)との間における分子間相互作用(ファンデルワールス力、双極子-双極子相互作用、水素結合性相互作用、イオン性相互作用)の違いによって生じると考えられる。

1-オクタノールは、一般に生体分子の代替物(Surrogate)としてよく用いられるが、水素結合性相互作用、イオン性相互作用などの比較的強い(極性)相互作用に関係し得るのはアルコール基(-OH)のみであって、リン脂質に含まれるアミノ基(-NH₂、-NHR、-NRR')などの生体分子の多種多様な官能基の特性を全て記述できるわけではない。従って、水素結合性相互作用、イオン性相互作用が生物濃縮性に影響を与える物質では、 μ_{oct}^0 と μ_{f}^0 の違いが顕著となり、また、その違いの程度は個々の物質によって異なることから、 $\mu_{\text{oct}}^0 \propto \mu_{\text{f}}^0$ の関係は成立し難い。

一方、ファンデルワールス力、双極子-双極子相互作用などの比較的弱い(非極性)相互作用のみが生物濃縮性に影響を与える物質群では、上述のような違いは生じ難いと考えられ、 μ_{oct}^0 と μ_{f}^0 は近似または比例関係を示し、 $\log \text{Pow}$ と $\log \text{BCF}$ は直線関係を持つことが期待できる。

3. カテゴリー I 及び II-A に該当する物質とカテゴリー II-B に該当する物質における $\log \text{Pow}$ と $\log \text{BCF}$ との相関の違いについて

カテゴリー I 及び II-A に該当する物質の $\log \text{Pow}$ (実測値) または $\log \text{Pow}$ (計算値) と $\log \text{BCF}$ とのプロットを Fig.2a、2b に示す。また、カテゴリー I 及び II-A における予測式(1)または予測式(2)及びカテゴリー II-B に該当する $D_{\text{max}} < 11 \text{ \AA}$ の物質の $\log \text{Pow}$ (実測値) または $\log \text{Pow}$ (計算値) と $\log \text{BCF}$ とのプロットした結果を Fig.2c、2d に示す。Fig.における予測式における R^2 、 Q^2 は、それぞれ予測式(1)、予測式(2)における決定係数、クロスバリデーション(leave-one-out 法)後の決定係数である。

Fig2a~Fig.2d における $\log \text{Pow}$ と $\log \text{BCF}$ との相関の比較結果から、カテゴリー II-B に該当する物質の $\log \text{Pow}$ と $\log \text{BCF}$ との相関は、カテゴリー I 及び II-A に該当する物質の $\log \text{Pow}$ と $\log \text{BCF}$ との相関よりも弱く、カテゴリー II-B に該当する物質の全体的な相関は、カテゴリー I 及びカテゴリー II-A の予測式(1)及び(2)の傾きよりも小さい傾向にあることが分かった。この結果は、カテゴリー II-B に該当する化学物質の生物濃縮性において、カテゴリー I 及びカテゴリー II-A とは異なる分子間相互作用(水素結合性ドナーによる水素結合性相互作用)及び代謝反応が影響したためと考えられる。

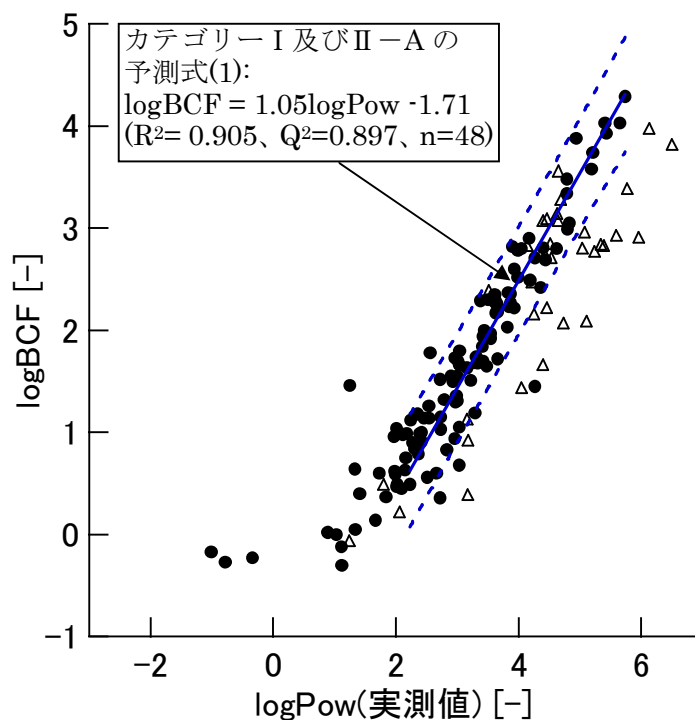


Fig.2a logPow(実測値) vs. logBCF プロット(カテゴリー I 及び II - A に該当する全 146 物質)

- : カテゴリー I 及び II - A に該当する $D_{\text{max}}^{*4} < 11 \text{ \AA}$ かつ $\log\text{Pow}(\text{実測値}) < 6$ の物質(111 物質)、
- △: カテゴリー I 及び II - A に該当する $D_{\text{max}}^{*4} \geq 11 \text{ \AA}$ または $\log\text{Pow}(\text{実測値}) \geq 6$ の物質(35 物質)、
- … 予測式(1)の 95%信頼限界]

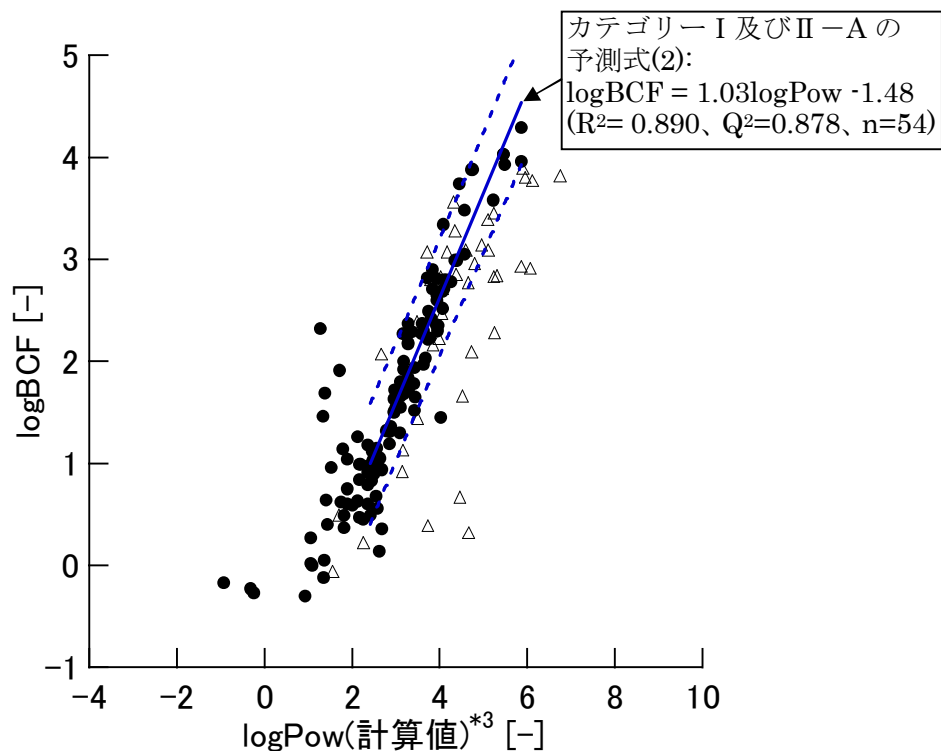


Fig.2b logPow(計算値) vs. logBCF プロット(カテゴリー I 及び II - A に該当する全 165 物質)

- : カテゴリー I 及び II - A に該当する $D_{\text{max}}^{*4} < 11 \text{ \AA}$ かつ $\log\text{Pow}(\text{計算値}) < 6$ の物質(121 物質)、
- △: カテゴリー I 及び II - A に該当する $D_{\text{max}}^{*4} \geq 11 \text{ \AA}$ または $\log\text{Pow}(\text{計算値}) \geq 6$ の物質(44 物質)、
- … 予測式(2)の 95%信頼限界]

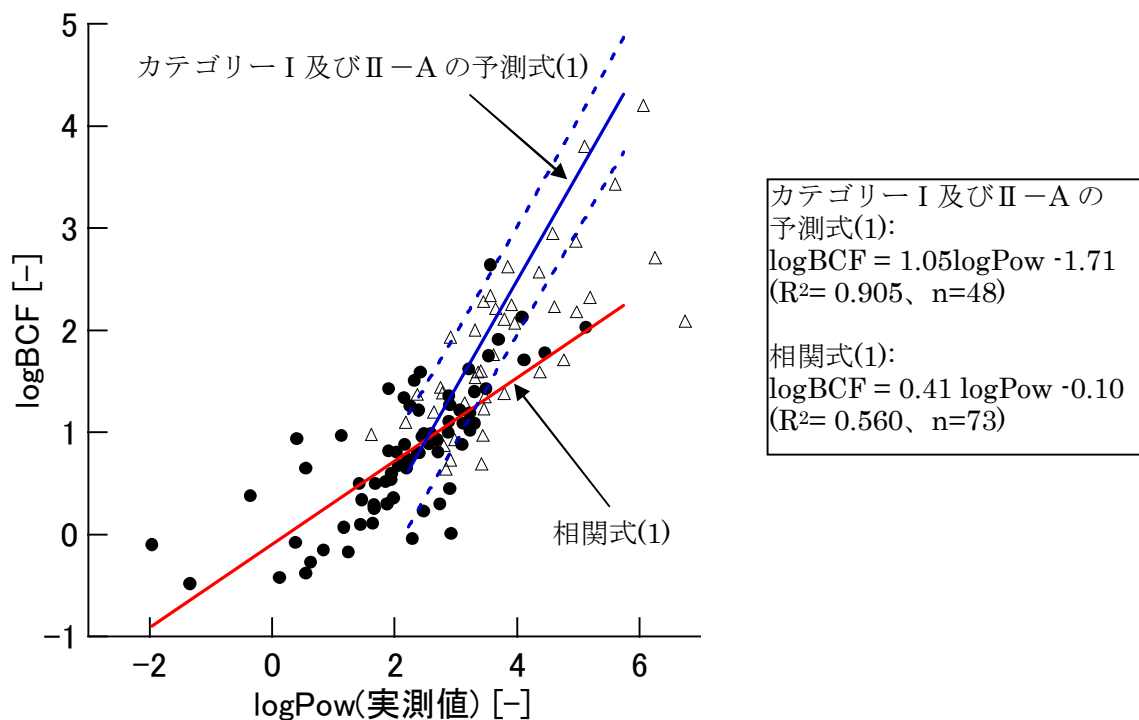


Fig.2c logPow(実測値) vs. logBCF プロット(全 115 物質)

[●: カテゴリー II-B に該当する $D_{max}^{*4} < 11 \text{ \AA}$ の物質(73 物質)、△: カテゴリー II-B に該当する $D_{max}^{*4} \geq 11 \text{ \AA}$ の物質(42 物質)、--- 予測式(1)の 95%信頼限界]

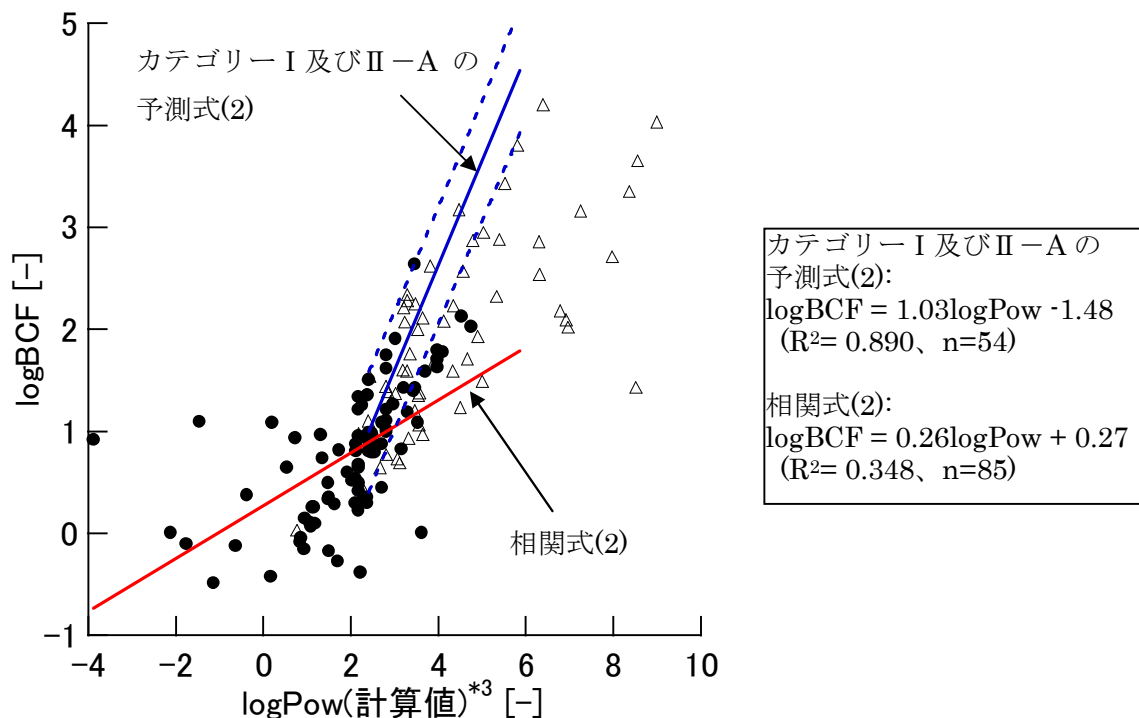


Fig.2d logPow(計算値) vs. logBCF プロット(全 144 物質)

[●: カテゴリー II-B に該当する $D_{max}^{*4} < 11 \text{ \AA}$ の物質(85 物質)、△: カテゴリー II-B に該当する $D_{max}^{*4} \geq 11 \text{ \AA}$ の物質(59 物質)、--- 予測式(2)の 95%信頼限界]

4. カテゴリーⅡ-B に該当する物質の重回帰分析結果

Table1-1 logPow(実測値)とその他の1変数を用いた重回帰分析結果

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ (R2=0.676)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.426	0.771	11.354	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.008	-0.137	-2.018	0.047	*
定数項	0.074		0.614	0.541	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR (R2=0.667)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.404	0.731	8.126	0.000	**
MR [-]	0.066	0.119	1.323	0.190	
定数項	-0.227		-1.329	0.188	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、|pH-pKa|
(R2=0.662)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.443	0.801	11.835	0.000	**
pH-pKa	0.054	0.052	0.771	0.443	
定数項	-0.045		-0.420	0.676	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、Hy_acc、Hy_don
(R2=0.674)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.451	0.816	12.449	0.000	**
Hy_acc	-0.052	-0.063	-0.914	0.364	
Hy_don	-0.168	-0.088	-1.278	0.205	
定数項	0.190		1.072	0.287	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、TPSA
(R2=0.666)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.433	0.783	11.192	0.000	**
TPSA [Å ²]	-0.003	-0.084	-1.205	0.232	
定数項	0.094		0.591	0.556	

※判定における ** (パラメータが 1%有意)、* (パラメータが 5%有意)

Table1-2 logPow(実測値)とその他の 2 変数を用いた重回帰分析結果

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、MR (R2=0.685)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.376	0.680	7.468	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.008	-0.143	-2.119	0.037	*
MR [-]	0.072	0.130	1.479	0.143	
定数項	-0.116		-0.661	0.511	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、|pH-pKa| (R2=0.679)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.421	0.761	10.966	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.008	-0.136	-2.002	0.049	*
pH-pKa	0.052	0.051	0.760	0.449	
定数項	0.077		0.642	0.523	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、Hy_acc、Hy_don (R2=0.687)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.431	0.779	11.463	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.007	-0.120	-1.738	0.086	
Hy_acc	-0.039	-0.046	-0.676	0.501	
Hy_don	-0.153	-0.080	-1.180	0.242	
定数項	0.268		1.485	0.142	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、TPSA (R2=0.677)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.428	0.775	11.154	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.009	-0.158	-1.622	0.109	
TPSA [A2]	0.001	0.030	0.303	0.763	
定数項	0.042		0.263	0.793	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR、|pH-pKa| (R2=0.677)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.392	0.709	7.653	0.000	**
MR [-]	0.072	0.131	1.441	0.154	
pH-pKa	0.067	0.065	0.964	0.338	
定数項	-0.239		-1.396	0.167	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR、Hy_acc、Hy_don (R2=0.709)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.336	0.608	6.502	0.000	**
MR [-]	0.170	0.308	2.976	0.004	**
Hy_acc	-0.072	-0.086	-1.305	0.196	
Hy_don	-0.393	-0.206	-2.691	0.009	**
定数項	0.004		0.025	0.980	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR、TPSA (R2=0.684)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.344	0.622	6.004	0.000	**
MR [-]	0.112	0.203	2.081	0.041	*
TPSA [A2]	-0.005	-0.152	-2.007	0.048	*
定数項	-0.096		-0.532	0.596	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、|pH-pKa|、Hy_acc、Hy_don (R2=0.677)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.445	0.805	12.000	0.000	**
pH-pKa	0.056	0.054	0.807	0.422	
Hy_acc	-0.055	-0.066	-0.959	0.341	
Hy_don	-0.164	-0.086	-1.246	0.217	
定数項	0.192		1.085	0.281	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、|pH-pKa|、TPSA (R2=0.669)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.425	0.770	10.708	0.000	**
pH-pKa	0.061	0.059	0.877	0.383	
TPSA [A2]	-0.003	-0.090	-1.272	0.207	
定数項	0.107		0.673	0.503	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R2=0.675)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.445	0.805	11.256	0.000	**
Hy_acc	-0.045	-0.055	-0.753	0.454	
Hy_don	-0.152	-0.080	-1.102	0.274	
TPSA [A2]	-0.001	-0.031	-0.395	0.694	
定数項	0.218		1.137	0.259	

※判定における ** (パラメータが 1%有意)、* (パラメータが 5%有意)

Table1-3 logPow(実測値)とその他の3変数を用いた重回帰分析結果

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、MR、|pH-pKa| (R²=0.689)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.364	0.659	7.037	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.008	-0.143	-2.114	0.038	*
MR [-]	0.078	0.142	1.597	0.115	
pH-pKa	0.067	0.065	0.977	0.332	
定数項	-0.128		-0.730	0.468	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、MR、Hy_acc、Hy_don (R²=0.721)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.318	0.575	6.112	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.006	-0.116	-1.771	0.081	
MR [-]	0.168	0.304	2.985	0.004	**
Hy_acc	-0.058	-0.070	-1.063	0.291	
Hy_don	-0.377	-0.198	-2.608	0.011	*
定数項	0.082		0.451	0.654	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、MR、TPSA (R²=0.687)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.357	0.646	6.029	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.005	-0.094	-0.900	0.371	
MR [-]	0.092	0.166	1.565	0.122	
TPSA [Å ²]	-0.002	-0.072	-0.611	0.543	
定数項	-0.092		-0.510	0.612	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、|pH-pKa|、Hy_acc、Hy_don (R²=0.690)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.425	0.769	11.085	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.007	-0.118	-1.718	0.090	
pH-pKa	0.054	0.052	0.784	0.435	
Hy_acc	-0.041	-0.050	-0.722	0.473	
Hy_don	-0.150	-0.079	-1.150	0.254	
定数項	0.270		1.492	0.140	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、|pH-pKa|、TPSA (R²=0.679)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.422	0.764	10.709	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.008	-0.151	-1.534	0.129	
pH-pKa	0.050	0.049	0.722	0.472	
TPSA [Å ²]	0.001	0.020	0.204	0.839	
定数項	0.056		0.345	0.731	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R²=0.694)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.443	0.801	11.457	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.012	-0.210	-2.110	0.038	*
Hy_acc	-0.060	-0.072	-1.007	0.317	
Hy_don	-0.214	-0.112	-1.547	0.126	
TPSA [Å ²]	0.005	0.140	1.254	0.214	
定数項	0.199		1.062	0.292	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR、|pH-pKa|、Hy_acc、Hy_don (R²=0.716)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.318	0.575	5.985	0.000	**
MR [-]	0.182	0.330	3.171	0.002	**
pH-pKa	0.090	0.087	1.352	0.180	
Hy_acc	-0.077	-0.093	-1.416	0.161	
Hy_don	-0.404	-0.212	-2.774	0.007	**
定数項	-0.005		-0.026	0.979	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR、|pH-pKa|、TPSA (R²=0.691)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.321	0.581	5.405	0.000	**
MR [-]	0.126	0.228	2.306	0.024	*
pH-pKa	0.092	0.089	1.325	0.189	
TPSA [Å ²]	-0.006	-0.168	-2.201	0.031	*
定数項	-0.099		-0.551	0.584	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R²=0.715)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.304	0.549	5.276	0.000	**
MR [-]	0.190	0.344	3.219	0.002	**
Hy_acc	-0.052	-0.063	-0.915	0.363	
Hy_don	-0.370	-0.194	-2.524	0.014	*
TPSA [Å ²]	-0.003	-0.098	-1.267	0.209	
定数項	0.071		0.383	0.703	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、|pH-pKa|、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R²=0.678)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.437	0.791	10.781	0.000	**
pH-pKa	0.059	0.057	0.839	0.404	
Hy_acc	-0.047	-0.057	-0.779	0.438	
Hy_don	-0.145	-0.076	-1.049	0.297	
TPSA [Å ²]	-0.001	-0.037	-0.462	0.645	
定数項	0.226		1.174	0.244	

※判定における** (パラメータが1%有意)、* (パラメータが5%有意)

Table1-4 logPow(実測値)とその他の4変数を用いた重回帰分析結果

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、MR、|pH-pKa|、Hy_acc、Hy_don (R2=0.727)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.301	0.544	5.635	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.006	-0.114	-1.750	0.084	
MR [-]	0.180	0.326	3.175	0.002	**
pH-pKa	0.087	0.084	1.331	0.187	
Hy_acc	-0.064	-0.077	-1.174	0.244	
Hy_don	-0.387	-0.203	-2.691	0.009	**
定数項	0.072		0.396	0.693	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、MR、|pH-pKa|、TPSA (R2=0.693)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判
logPow (実測値) [-]	0.333	0.603	5.334	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.004	-0.070	-0.656	0.514	
MR [-]	0.110	0.198	1.811	0.074	
pH-pKa	0.082	0.080	1.166	0.248	
TPSA [Å ²]	-0.004	-0.107	-0.884	0.379	
定数項	-0.095		-0.531	0.597	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、MR、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R2=0.721)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.321	0.580	5.431	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.007	-0.123	-1.220	0.226	
MR [-]	0.166	0.300	2.664	0.009	
Hy_acc	-0.059	-0.072	-1.045	0.300	
Hy_don	-0.379	-0.198	-2.585	0.012	
TPSA [Å ²]	0.000	0.012	0.098	0.922	
定数項	0.079		0.427	0.671	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、|pH-pKa|、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R2=0.695)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判
logPow (実測値) [-]	0.437	0.791	11.004	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.011	-0.203	-2.016	0.047	*
pH-pKa	0.042	0.041	0.616	0.540	
Hy_acc	-0.060	-0.073	-1.015	0.314	
Hy_don	-0.207	-0.108	-1.485	0.142	
TPSA [Å ²]	0.005	0.131	1.149	0.254	
定数項	0.206		1.090	0.279	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR、|pH-pKa|、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R2=0.724)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.278	0.502	4.670	0.000	**
MR [-]	0.208	0.376	3.484	0.001	**
pH-pKa	0.102	0.099	1.546	0.127	
Hy_acc	-0.056	-0.067	-0.986	0.327	
Hy_don	-0.379	-0.199	-2.603	0.011	*
TPSA [Å ²]	-0.004	-0.114	-1.472	0.145	
定数項	0.072		0.388	0.699	

Table1-5 logPow(実測値)とその他の5変数を用いた重回帰分析結果

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、MR、|pH-pKa|、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R2=0.727)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logPow (実測値) [-]	0.294	0.532	4.746	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.005	-0.097	-0.949	0.346	
MR [-]	0.186	0.337	2.922	0.005	**
pH-pKa	0.090	0.088	1.335	0.186	
Hy_acc	-0.061	-0.074	-1.078	0.285	
Hy_don	-0.384	-0.201	-2.636	0.010	*
TPSA [Å ²]	-0.001	-0.025	-0.211	0.833	
定数項	0.078		0.421	0.675	

※判定における** (パラメータが1%有意)、* (パラメータが5%有意)

Table2-1 logD とその他の 1 変数を用いた重回帰分析結果

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ (R2=0.486)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.310	0.614	7.254	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.012	-0.207	-2.448	0.017	*
定数項	0.509		3.989	0.000	**

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR (R2=0.523)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.235	0.466	4.792	0.000	**
MR [-]	0.190	0.344	3.536	0.001	**
定数項	-0.269		-1.313	0.193	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、Hy_acc、Hy_don (R2=0.462)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.340	0.674	7.991	0.000	**
Hy_acc	0.008	0.010	0.115	0.909	
Hy_don	-0.250	-0.131	-1.479	0.143	
定数項	0.623		2.915	0.005	**

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、TPSA (R2=0.464)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.313	0.620	7.020	0.000	**
TPSA	-0.005	-0.144	-1.630	0.107	
定数項	0.579		3.224	0.002	**

Table2-2 logD とその他の 2 変数を用いた重回帰分析結果

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、MR (R2=0.562)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.209	0.414	4.322	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.011	-0.204	-2.598	0.011	*
MR [-]	0.189	0.341	3.639	0.000	**
定数項	-0.107		-0.520	0.605	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、Hy_acc、Hy_don (R2=0.498)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.314	0.622	7.323	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.011	-0.198	-2.301	0.024	*
Hy_acc	0.027	0.032	0.370	0.713	
Hy_don	-0.220	-0.115	-1.331	0.187	
定数項	0.7218		3.4003	0.0011	**

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、 $\mu 2$ 、TPSA (R2=0.486)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.311	0.616	7.074	0.000	**
$\mu 2$ [D2]	-0.012	-0.219	-1.790	0.077	
TPSA	0.001	0.017	0.138	0.890	
定数項	0.491		2.675	0.009	**

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR、Hy_acc、Hy_don (R2=0.617)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.176	0.349	3.750	0.000	**
MR [-]	0.311	0.563	5.494	0.000	**
Hy_acc	-0.056	-0.067	-0.876	0.384	
Hy_don	-0.624	-0.327	-3.922	0.000	**
定数項	0.0938151		0.45634	0.6495	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、MR、TPSA (R2=0.583)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.157	0.310	3.019	0.003	**
MR [-]	0.251	0.453	4.662	0.000	**
TPSA	-0.010	-0.276	-3.314	0.001	**
定数項	-0.028		-0.136	0.892	

目的変数: logBCF、説明変数: logPow(実測値)、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R2=0.472)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.320	0.634	7.014	0.000	**
Hy_acc	0.032	0.038	0.418	0.677	
Hy_don	-0.185	-0.097	-1.043	0.300	
TPSA	-0.004	-0.119	-1.193	0.237	
定数項	0.714		3.155	0.002	**

※判定における ** (パラメータが 1%有意)、* (パラメータが 5%有意)

Table2-3 logD とその他の 3 変数を用いた重回帰分析結果

目的変数: logBCF、説明変数: logD、 μ^2 、MR、Hy_acc、Hy_don (R²=0.639)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.161	0.320	3.488	0.001	**
μ^2 [D2]	-0.009	-0.158	-2.143	0.035	*
MR [-]	0.299	0.542	5.380	0.000	**
Hy_acc	-0.039	-0.047	-0.618	0.538	
Hy_don	-0.585	-0.307	-3.741	0.000	**
定数項	0.193		0.937	0.352	

目的変数: logBCF、説明変数: logD、 μ^2 、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R²=0.501)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.322	0.639	7.215	0.000	**
μ^2 [D2]	-0.015	-0.262	-2.061	0.043	*
Hy_acc	0.013	0.016	0.175	0.862	
Hy_don	-0.264	-0.138	-1.486	0.142	
TPSA	0.003	0.099	0.689	0.493	
定数項	0.678		3.049	0.003	**

目的変数: logBCF、説明変数: logD、 μ^2 、MR、TPSA (R²=0.584)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.159	0.315	2.952	0.004	**
μ^2 [D2]	-0.001	-0.022	-0.181	0.857	
MR [-]	0.246	0.446	4.194	0.000	**
TPSA	-0.009	-0.258	-1.967	0.053	
定数項	-0.027		-0.129	0.898	

目的変数: logBCF、説明変数: logD、MR、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R²=0.643)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.133	0.263	2.695	0.009	**
MR [-]	0.331	0.599	5.945	0.000	**
Hy_acc	-0.022	-0.026	-0.340	0.735	
Hy_don	-0.541	-0.283	-3.411	0.001	**
TPSA	-0.007	-0.195	-2.334	0.022	*
定数項	0.209		1.018	0.312	

Table2-4 logD とその他の 4 変数を用いた重回帰分析結果

目的変数: logBCF、説明変数: logD、 μ^2 、MR、Hy_acc、Hy_don、TPSA (R²=0.644)

変数名	偏回帰係数	標準 偏回帰係数	t 値	P 値	判定
logD [-]	0.139	0.276	2.743	0.008	**
μ^2 [D2]	-0.004	-0.066	-0.575	0.567	
MR [-]	0.320	0.580	5.429	0.000	**
Hy_acc	-0.025	-0.030	-0.383	0.703	
Hy_don	-0.549	-0.288	-3.433	0.001	**
TPSA	-0.005	-0.138	-1.062	0.292	
定数項	0.217		1.047	0.299	

※判定における ** (パラメータが 1% 有意)、* (パラメータが 5% 有意)

1. カテゴリー II -B に該当する生物濃縮性が既知の化審法既存化学物質のリスト

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質))

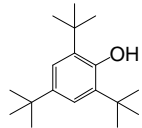
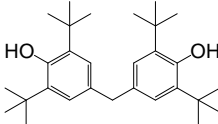
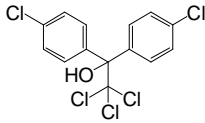
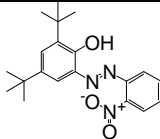
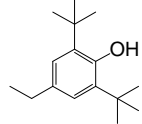

No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
1	732-26-3		262.4	11.49	4.18	-	-	6.06	6.39	-	1.99	8.18	20.23	1	1	-4.84	-	-	12.61	-
2	118-82-1		424.7	15.65	4.01	-	-	-	8.99	-	4.73	13.04	40.46	2	2	-4.26	-	-	12.03	-
3	115-32-2		370.5	13.12	3.78	4.19	5.12	5.10	5.81	-	1.23	8.56	20.23	1	1	-2.93	-	-	10.70	-
4	52184-14-2		355.4	15.12	3.63	-	-	-	8.55	-	38.44	10.10	90.77	3	1	-1.82	-	-	9.59	-
5	4130-42-1		234.4	11.56	3.41	4.73	4.81	5.60	5.52	-	1.95	7.33	20.23	1	1	-5.06	-	-	12.83	-
6	307-70-0		532.1	15.23	3.33	-	-	-	8.36	-	9.84	5.30	20.23	1	1	-5.12	-	-	12.89	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

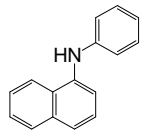
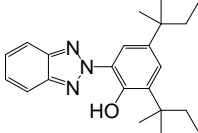
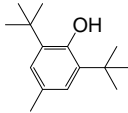
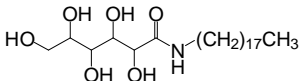
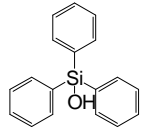
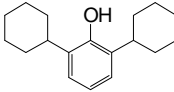
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
7	90-30-2		219.3	13.65	3.15	-	3.70	-	4.47	-	0.63	7.14	12.03	0	1	6.99	-	-	0.78	-
8	25973-55-1		351.5	15.03	3.14	-	-	-	7.25	-	0.57	10.64	50.94	3	1	-1.08	-	-	0.74	8.85
9	128-37-0		220.4	11.52	2.93	3.63	4.29	4.58	5.03	4.58	1.84	6.87	20.23	1	1	-6.23	14.00	-	12.76	-
10	18375-66-1		447.6	34.41	2.86	-	4.67	-	5.39	-	7.27	12.56	130.25	6	6	8.66	-	-	-0.89	12.47
11	791-31-1		276.4	12.07	2.85	4.04	4.04	4.96	4.79	-	3.18	9.24	20.23	1	1	-5.62	-	-	13.39	-
12	4821-19-6		258.4	14.86	2.84	-	-	-	6.30	-	1.83	8.01	20.23	1	1	-2.82	-	-	10.59	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

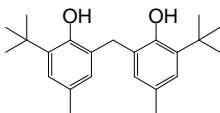
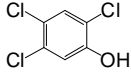
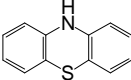
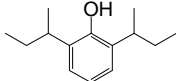
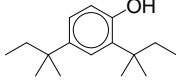
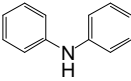
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
13	119-47-1		340.5	16.44	2.69	-	-	6.25	7.97	-	6.80	10.41	40.46	2	2	-3.56	-	-	11.33	-
14	95-95-4		197.4	9.5	2.64	2.55	<2.70	3.56	3.45	2.48	1.71	4.25	20.23	1	1	1.06	6.71	-	7.10	-
15	92-84-2		199.3	11.73	2.60	2.86	3.03	3.85	3.82	3.85	3.30	6.05	12.03	0	1	5.25	2.52	-	-1.87	-
16	5510-99-6		206.3	13.49	2.55	3.40	3.80	4.36	4.56	-	1.54	6.54	20.23	1	1	-2.80	-	-	10.57	-
17	120-95-6		234.4	12.39	2.52	-	-	-	6.31	-	1.16	7.37	20.23	1	1	-3.23	-	-	11.00	-
18	122-39-4		169.2	11.64	2.32	2.55	<2.70	3.56	3.29	3.56	0.61	5.54	12.03	0	1	6.94	0.83	-	0.78	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

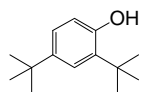
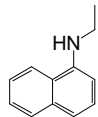
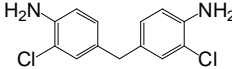
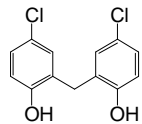
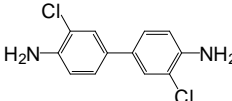
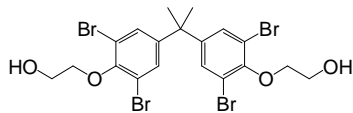
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
19	96-76-4		206.3	11.13	2.30	4.28	4.61	5.19	5.33	5.19	1.16	6.42	20.23	1	1	-3.88	11.65	-	11.56	-
20	118-44-5		171.2	11.71	2.26	<2.50	<2.70	3.45	3.29	3.45	2.78	5.59	12.03	0	1	3.58	4.19	-	5.12	-
21	101-14-4		267.2	12.97	2.23	2.92	<2.70	3.91	3.47	-	1.80	7.20	52.04	0	2	4.44	-	-	3.33	-
22	97-23-4		269.1	11.74	2.21	3.66	3.57	4.61	4.34	4.23	8.99	6.94	40.46	2	2	0.17	7.60	11.50	9.15	9.85
23	91-94-1		253.1	13.12	2.19	2.65	<2.70	3.65	3.21	-	1.23	6.73	52.04	0	2	5.07	-	-	2.70	-
24	4162-45-2		632.0	15.9	2.16	4.05	-	4.97	6.78	-	20.29	12.03	58.92	4	2	-5.99	-	-	13.76	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

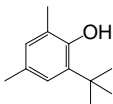
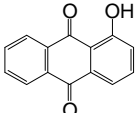
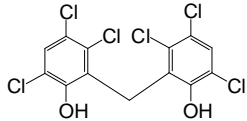
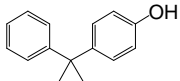
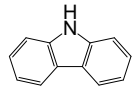
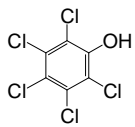
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
25	1879-09-0		178.3	10.24	2.13	3.10	3.76	4.08	4.52	4.08	1.85	5.55	20.23	1	1	-4.20	11.97	-	12.00	-
26	129-43-1		224.2	11.67	2.09	2.79	2.85	3.79	3.64	3.78	4.52	6.25	54.37	3	1	-3.71	11.48	-	7.15	-
27	70-30-4		406.9	13.6	2.07	-	-	6.74	6.92	4.63	5.46	8.69	40.46	2	2	2.12	5.65	10.1	6.49	-
28	599-64-4		212.3	11.40	2.06	-	3.34	-	4.12	-	1.45	6.71	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	10.62	-
29	86-74-8		167.2	11.16	2.05	2.97	<2.70	3.96	3.23	-	1.44	5.40	15.79	0	1	10.17	-	-	-2.40	17.00
30	87-86-5		266.3	9.51	2.03	4.21	3.99	5.12	4.74	2.12	1.54	5.06	20.23	1	1	3.02	4.75	-	4.68	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

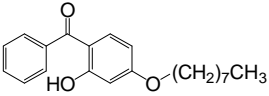
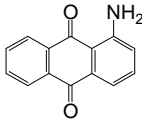
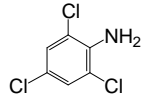
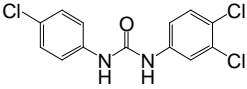
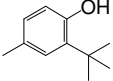
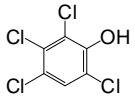
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
31	1843-05-6		326.4	22.46	2.00	-	-	-	6.96	-	7.33	9.85	46.53	3	1	0.18	-	-	7.59	-
32	82-45-1		223.2	11.70	1.98	<2.50	2.73	3.31	3.53	3.30	3.29	6.42	60.16	2	1	6.53	1.24	-	-0.51	-
33	634-93-5		196.5	9.16	1.91	2.69	<2.70	3.69	3.01	3.69	3.44	4.39	26.02	0	1	7.80	-0.03	-	0.07	-
34	101-20-2		315.6	15.12	1.91	<2.50	4.15	2.91	4.90	-	18.47	7.84	41.13	1	2	8.11	-	-	-0.34	12.77
35	2409-55-4		164.2	10.01	1.80	-	3.19	-	3.97	-	1.00	5.11	20.23	1	1	-3.95	11.72	-	11.64	-
36	58-90-2		231.9	9.5	1.78	3.49	3.31	4.45	4.09	1.92	3.13	4.67	20.23	1	1	2.55	5.22	-	5.64	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

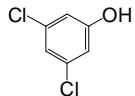
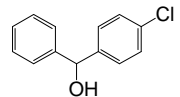
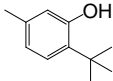
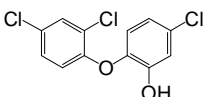
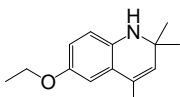
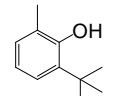
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
37	591-35-5		163.0	8.64	1.75	2.52	<2.70	3.53	2.80	3.39	1.99	3.82	20.23	1	1	-0.41	8.18	-	8.04	-
38	119-56-2		218.7	12.15	1.74	2.61	<2.70	3.61	3.35	-	0.66	6.34	20.23	1	1	-5.57	-	-	13.34	-
39	88-60-8		164.2	10.44	1.71	3.13	3.19	4.11	3.97	-	1.56	5.11	20.23	1	1	-3.68	-	-	11.45	-
40	3380-34-5		289.5	13.65	1.69	3.82	3.90	4.76	4.66	-	4.29	6.95	29.46	1	1	-0.03	-	-	7.80	-
41	91-53-2		217.3	13.62	1.64	-	3.08	-	3.87	-	1.65	6.62	21.26	1	1	2.93	4.84	-	5.02	-
42	2219-82-1		164.2	10.24	1.63	-	3.19	-	3.97	-	1.36	5.11	20.23	1	1	-3.92	-	-	11.69	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

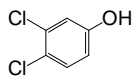
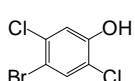
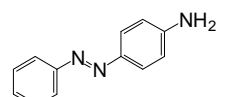
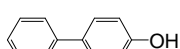
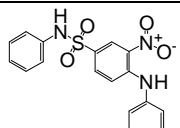
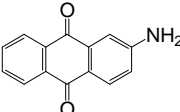
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
43	95-77-2		163.0	9	1.62	<2.50	<2.70	3.21	2.80	3.15	4.25	3.82	20.23	1	1	-0.81	8.58	-	8.56	-
44	1940-42-7		241.9	9.49	1.59	<2.50	2.90	2.42	3.69	-	1.87	4.54	20.23	1	1	0.79	-	-	6.98	-
45	60-09-3		197.2	11.68	1.58	<2.50	<2.70	3.41	3.19	3.41	22.06	6.05	50.74	2	1	4.84	2.93	-	3.12	-
46	92-69-3		170.2	12.07	1.57	<2.50	<2.70	3.36	3.28	3.35	1.40	5.38	20.23	1	1	-1.67	9.44	-	9.82	-
47	5124-25-4		369.4	14.03	1.57	3.41	3.56	4.37	4.33	-	31.17	9.87	104.02	2	2	11.84	-	-	-4.07	7.76
48	117-79-3		223.2	12.72	1.52	<2.50	<2.70	3.31	2.43	3.31	7.70	6.42	60.16	2	1	5.97	1.80	-	0.97	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]


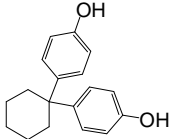
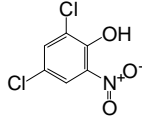
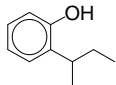
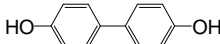
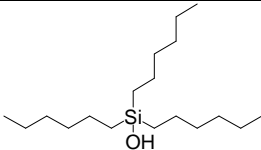
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
49	95-56-7		173.0	8.66	1.51	<2.50	<2.70	2.32	2.40	2.24	6.46	3.63	20.23	1	1	-0.67	8.44	-	8.43	-
50	843-55-0		268.4	12.17	1.47	-	4.26	-	5.00	-	5.30	8.08	40.46	2	2	-2.14	-	-	9.91	-
51	609-89-2		208.0	9.29	1.43	<2.50	<2.70	1.90	3.20	-1.15	9.14	4.33	66.05	1	1	3.17	4.60	-	4.64	-
52	89-72-5		150.2	10.38	1.43	<2.50	<2.70	3.49	3.46	3.49	0.90	4.73	20.23	1	1	-2.91	10.68	-	10.36	-
53	92-88-6		186.2	12.67	1.42	<2.50	<2.70	2.75	2.80	-	0.68	5.52	40.46	2	2	-1.97	-	-	9.74	-
54	60782-58-3		300.6	17.35	1.41	-	-	-	8.51	-	2.53	10.01	20.23	1	1	-7.69	-	-	15.46	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

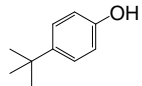
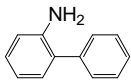
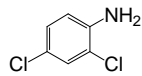
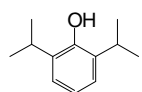
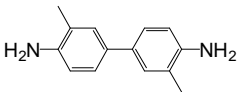

No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
55	98-54-4		150.2	10.2	1.40	<2.50	<2.70	3.30	3.42	3.30	1.84	4.67	20.23	1	1	-2.54	10.31	-	10.13	-
56	90-41-5		169.2	11.43	1.37	<2.50	<2.70	2.78	2.84	2.78	2.13	5.51	26.02	0	1	3.95	3.82	-	3.81	-
57	554-00-7		162.0	9.17	1.36	<2.50	<2.70	2.88	2.37	2.88	6.22	3.96	26.02	0	1	5.74	2.04	-	2.02	-
58	2078-54-8		178.3	11.11	1.36	2.80	2.77	3.79	3.57	3.79	1.59	5.60	20.23	1	1	-3.33	11.10	-	11.00	-
59	119-93-7		212.3	13.07	1.35	<2.50	<2.70	2.37	3.02	2.36	0.96	6.66	52.04	0	2	4.47	3.30	4.50	4.59	-
60	95-57-8		128.6	8.32	1.34	<2.50	<2.70	2.15	2.16	2.08	5.76	3.38	20.23	1	1	-0.76	8.53	-	8.50	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

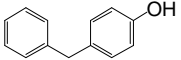
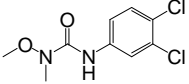
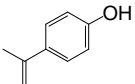

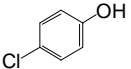
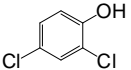
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
61	101-53-1		184.2	11.8	1.33	<2.50	2.74	3.47	3.54	0.93	1.48	5.85	20.23	1	1	-2.52	10.29	-	10.23	-
62	330-55-2		249.1	13.13	1.27	<2.50	<2.70	3.14	2.91	-	26.53	6.00	41.57	2	1	8.82	-	-	-1.05	12.13
63	4286-23-1		134.2	10.14	1.27	<2.50	<2.70	2.90	2.96	2.90	1.22	4.20	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	9.80	-
64	134-32-7		143.2	9.4	1.26	<2.50	<2.70	2.25	2.25	2.25	2.47	4.64	26.02	0	1	3.84	3.93	-	4.21	-
65	106-48-9		128.6	8.98	1.22	<2.50	<2.70	2.39	2.16	2.38	2.20	3.38	20.23	1	1	-1.52	9.29	-	9.47	-
66	120-83-2		163.0	8.97	1.22	<2.50	<2.70	3.06	2.80	2.82	0.17	3.82	20.23	1	1	-0.11	7.88	-	8.05	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

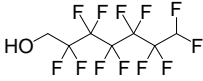
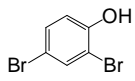
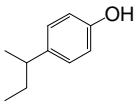
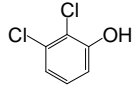
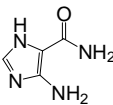
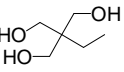
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
67	335-99-9		332.1	12.59	1.21	<2.50	3.74	3.46	4.50	-	6.38	3.60	20.23	1	1	-5.12	-	-	12.89	-
68	615-58-7		251.9	9.29	1.19	<2.50	<2.70	3.22	3.29	3.03	5.26	4.32	20.23	1	1	0.05	7.72	-	7.86	-
69	99-71-8		150.2	11.07	1.18	<2.50	<2.70	2.64	3.46	2.64	1.85	4.72	20.23	1	1	-2.60	10.37	-	10.11	-
70	576-24-9		163.0	8.33	1.11	<2.50	<2.70	2.88	2.80	2.58	0.75	3.83	20.23	1	1	0.01	7.76	-	7.53	-
71	72-40-2		126.1	8.76	1.10	-	<2.70	-	-1.47	-	0.91	3.06	97.79	3	4	3.75	4.02	-	4.74	14.79
72	77-99-6		134.2	8.65	1.09	-	<2.70	-	0.19	-	8.59	3.46	60.69	3	3	-6.24	-	-	14.01	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

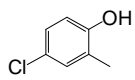
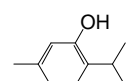
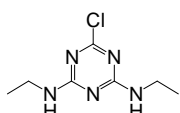
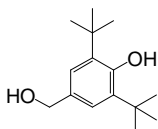
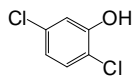
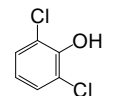
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
73	1570-64-5		142.6	9.01	1.09	<2.50	<2.70	3.12	2.70	3.11	3.16	3.83	20.23	1	1	-1.89	9.66	-	9.87	-
74	89-83-8		150.2	10.39	1.09	<2.50	2.72	3.30	3.52	3.30	1.54	4.69	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	10.59	-
75	122-34-9		201.7	13.66	1.08	<2.50	<2.70	2.18	2.40	2.18	15.29	5.13	62.73	3	2	5.97	1.80	-	2.71	-
76	88-26-6		236.4	11.58	1.04	-	2.76	-	3.56	-	6.90	7.05	40.46	2	2	-4.24	-	-	12.01	-
77	583-78-8		163.0	9.49	1.02	<2.50	<2.70	3.23	2.80	2.79	1.33	3.82	20.23	1	1	0.26	7.51	-	7.53	-
78	87-65-0		163.0	8.72	1.00	<2.50	<2.70	2.87	2.80	1.89	3.21	3.83	20.23	1	1	0.94	6.83	-	7.02	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

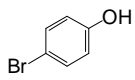
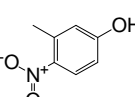
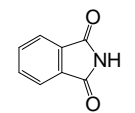
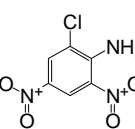
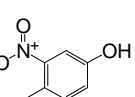
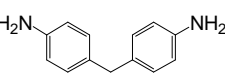
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
79	106-41-2		173.0	9.31	0.99	<2.50	<2.70	2.59	2.40	2.58	2.52	3.63	20.23	1	1	-1.44	9.21	-	9.34	-
80	2581-34-2		153.1	9.31	0.99	<2.50	<2.70	2.48	2.46	1.92	26.82	3.88	66.05	1	1	0.43	7.34	-	7.39	-
81	85-41-6		147.1	8.83	0.97	<2.50	<2.70	1.13	1.30	0.04	11.23	3.96	46.17	2	1	-0.53	8.30	-	10.39	-
82	3531-19-9		217.6	9.77	0.97	-	<2.70	-	2.48	-	39.11	4.50	117.66	0	1	14.45	-6.68	-	-6.83	-
83	2042-14-0		153.1	9.08	0.96	<2.50	<2.70	2.45	2.46	2.40	35.12	3.88	66.05	1	1	-0.85	8.62	-	8.66	-
84	101-77-9		198.3	13.14	0.96	<2.50	<2.70	1.62	2.18	1.61	8.66	6.24	52.04	0	2	2.59	5.19	-	5.32	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

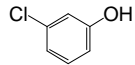
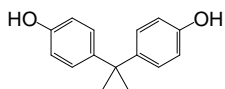

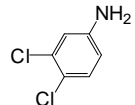
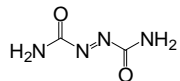
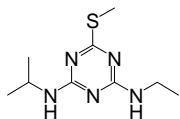
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [A]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [A ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
85	108-43-0		128.6	8.32	0.96	<2.50	<2.70	2.49	2.16	2.46	5.10	3.38	20.23	1	1	-1.25	9.02	-	9.00	-
86	80-05-7		228.3	12.35	0.95	<2.50	2.85	3.44	3.64	3.43	4.06	6.86	40.46	2	2	-3.12	10.89	-	10.29	-
87	75-64-9		73.1	6.51	0.94	<2.50	<2.70	0.40	0.72	-2.34	2.14	2.28	26.02	1	1	-2.97	10.74	-	10.68	-
88	95-76-1		162.0	9.14	0.93	<2.50	<2.70	2.69	2.37	2.69	10.59	3.96	26.02	0	1	4.80	2.97	-	2.90	-
89	123-77-3		116.1	9.44	0.92	-	<2.70	-	-3.89	-	12.06	2.37	110.90	4	2	9.21	-	-	-1.44	11.90
90	834-12-8		227.3	13.66	0.91	<2.50	<2.70	2.98	3.32	2.98	3.77	6.26	62.73	3	2	3.77	4.00	-	3.71	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

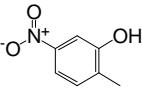
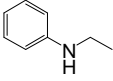
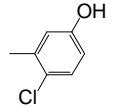
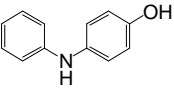
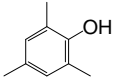
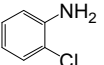
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
91	5428-54-6		153.1	9.51	0.89	<2.50	<2.70	2.56	2.46	2.50	42.35	3.88	66.05	1	1	-0.82	8.59	-	8.68	-
92	103-69-5		121.2	9.31	0.88	<2.50	<2.70	2.16	2.11	2.16	2.31	3.98	12.03	0	1	2.77	5.00	-	5.12	-
93	59-50-7		142.6	9	0.88	<2.50	<2.70	3.10	2.70	3.09	2.77	3.83	20.23	1	1	-1.70	9.47	-	9.63	-
94	122-37-2		185.2	12.37	0.85	<2.50	<2.70	2.80	2.46	-	2.33	5.71	32.26	1	2	6.01	-	-	1.76	10.46
95	527-60-6		136.2	8.92	0.83	-	<2.70	-	3.15	-	1.72	4.24	20.23	1	1	-3.14	10.91	-	10.97	-
96	95-51-2		127.6	8.32	0.82	<2.50	<2.70	1.90	1.72	1.90	3.13	3.51	26.02	0	1	5.19	2.58	-	2.65	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

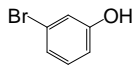
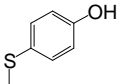
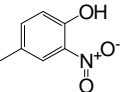
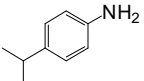
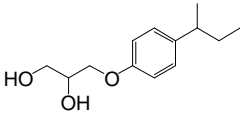
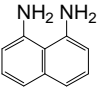
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
97	591-20-8		173.0	8.65	0.81	<2.50	<2.70	2.71	2.40	2.69	0.12	3.63	20.23	1	1	-1.15	8.92	-	9.00	-
98	1073-72-9		140.2	10.37	0.81	<2.50	<2.70	2.03	2.11	2.02	0.11	4.07	20.23	1	1	-1.69	9.46	-	9.74	-
99	119-33-5		153.1	9.2	0.80	<2.50	<2.70	2.37	2.46	2.00	20.89	3.88	66.05	1	1	0.15	7.62	-	7.45	-
100	99-88-7		135.2	10.30	0.80	<2.50	<2.70	2.40	2.53	2.40	2.04	4.37	26.02	0	1	2.92	4.85	-	5.01	-
101	-		224.3	15.29	0.75	-	<2.70	-	2.81	-	13.69	6.45	49.69	3	2	-5.76	-	-	13.53	-
102	479-27-6		158.2	9.4	0.74	<2.50	<2.70	2.21	1.34	2.21	6.78	4.90	52.04	0	2	3.79	3.98	-	4.46	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

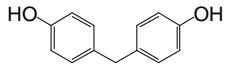

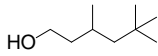
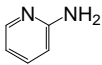
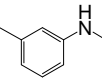
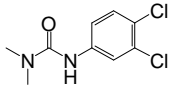
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
103	620-92-8		200.2	12.34	0.71	<2.50	<2.70	2.91	3.06	2.90	5.04	5.99	40.46	2	2	-1.86	9.63	10.32	9.91	-
104	611-21-2		121.2	9.37	0.68	<2.50	<2.70	2.06	2.17	2.05	1.98	3.97	12.03	0	1	3.16	4.61	-	4.73	-
105	3452-97-9		144.3	11.03	0.67	<2.50	<2.70	3.42	3.11	-	3.05	4.47	20.23	1	1	-7.36	-	-	15.13	-
106	504-29-0		94.1	7.94	0.65	<2.50	<2.70	0.55	0.53	0.55	3.20	2.85	38.91	1	1	15.37	-7.60	6.79	6.67	-
107	696-44-6		121.2	10.04	0.65	<2.50	<2.70	2.19	2.17	2.19	1.79	3.96	12.03	0	1	2.92	4.85	-	5.00	-
108	330-54-1		233.1	12.84	0.62	<2.50	<2.70	2.84	2.67	-	20.61	5.81	32.34	1	1	8.86	-	-	-1.09	13.55

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

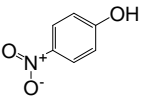
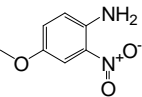
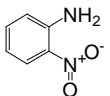
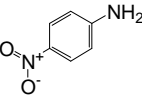
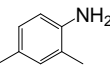
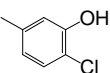
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
109	100-02-7		139.1	9.27	0.60	<2.50	<2.70	1.95	1.91	1.22	27.69	3.42	66.05	1	1	0.65	7.12	-	7.23	-
110	96-96-8		168.2	10.32	0.54	<2.50	<2.70	1.94	2.10	1.94	18.57	4.20	81.07	1	1	6.98	0.80	-	0.96	-
111	88-74-4		138.1	8.55	0.52	<2.50	<2.70	1.85	2.02	1.85	27.82	3.57	71.84	0	1	8.07	-0.30	-	-0.23	-
112	100-01-6		138.1	9.43	0.50	<2.50	<2.70	1.42	1.47	1.42	53.59	3.56	71.84	0	1	6.79	0.98	-	1.01	-
113	95-68-1		121.2	8.99	0.50	<2.50	<2.70	1.68	2.17	1.68	2.67	3.91	26.02	0	1	2.92	4.85	-	4.89	-
114	615-74-7		142.6	9.21	0.45	<2.50	<2.70	2.90	2.70	-	1.34	3.83	20.23	1	1	-0.83	-	-	8.60	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

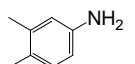
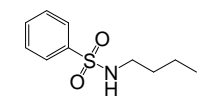
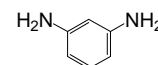
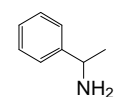
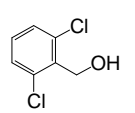
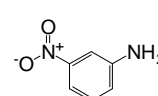
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
115	95-64-7		121.2	9.01	0.42	-	<2.70	-	2.17	-	2.11	3.91	26.02	0	1	2.60	5.17	-	5.15	-
116	3622-84-2		213.3	14.10	0.39	-	<2.70	-	2.31	-	26.22	5.91	46.17	2	1	-3.51	11.28	-	11.62	-
117	108-45-2		108.1	8.63	0.38	<2.50	<2.70	-0.36	-0.39	-0.36	0.95	3.28	52.04	0	2	5.36	2.41	5.035	4.88	-
118	98-84-0		121.2	9.31	0.36	-	<2.70	-	1.49	-	1.99	3.94	26.02	1	1	-1.45	9.22	-	9.04	-
119	15258-73-8		177.0	8.71	0.36	<2.50	<2.70	1.98	2.36	-	6.03	4.32	20.23	1	1	-5.80	-	-	13.57	-
120	99-09-2		138.1	9.2	0.34	<2.50	<2.70	1.46	1.47	1.45	35.45	3.56	71.84	0	1	5.36	2.41	-	2.46	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

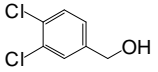
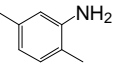
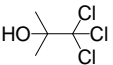
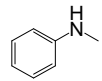
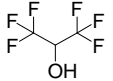
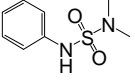
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
121	1805-32-9		177.0	9.69	0.30	<2.50	<2.70	2.74	2.36	-	0.81	4.32	20.23	1	1	-5.93	-	-	13.70	-
122	95-78-3		121.2	9.04	0.30	<2.50	<2.70	1.87	2.17	1.87	1.76	3.91	26.02	0	1	3.23	4.54	-	4.58	-
123	57-15-8		177.5	7.64	0.30	<2.50	<2.70	1.88	2.09	-	3.68	3.55	20.23	1	1	-5.10	-	-	12.87	-
124	100-61-8		107.2	9.38	0.29	<2.50	<2.70	1.66	1.62	1.66	1.69	3.52	12.03	0	1	2.88	4.90	-	4.70	-
125	920-66-1		168.0	7.45	0.26	<2.50	<2.70	1.66	1.11	1.65	7.87	1.76	20.23	1	1	-1.62	9.39	-	9.75	-
126	-		200.3	10.09	0.26	<2.50	<2.70	1.67	1.15	-	21.80	5.25	49.69	2	1	8.56	-	-	-0.79	7.44

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

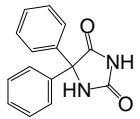

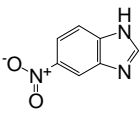

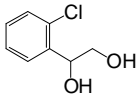
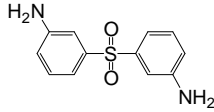
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
127	57-41-0		252.3	10.89	0.23	<2.50	<2.70	2.47	2.16	-	10.06	7.23	58.20	2	2	-0.51	-	-	-2.81	8.28
128	75-91-2		90.1	6.96	0.15	-	<2.70	-	0.94	-	4.50	2.35	29.46	2	1	-4.77	12.54	-	12.69	-
129	94-52-0		163.1	10.36	0.11	<2.50	<2.70	1.64	1.05	1.61	63.26	4.15	74.50	2	2	4.35	3.42	10.86	10.95	-
130	95-14-7		119.1	8.19	0.10	<2.50	<2.70	1.44	1.17	1.44	13.34	3.43	41.57	3	2	6.17	1.60	8.44	8.38	-
131	59365-60-5		172.6	9.98	0.07	<2.50	<2.70	1.17	1.08	-	9.61	4.48	40.46	2	2	-5.47	-	-	13.24	-
132	599-61-1		248.3	11.29	0.01	-	<2.70	-	0.77	-	16.93	6.77	86.18	2	2	4.61	-	-	3.16	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

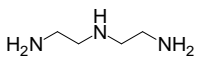
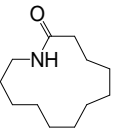
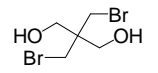
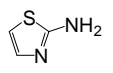
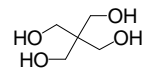
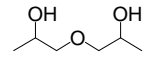
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
133	111-40-0		103.2	10.29	0.01	-	<2.70	-	-2.13	-	4.71	2.94	64.07	3	3	-1.26	9.03	9.82	9.97	-
134	947-04-6		197.3	9.88	0.01	<2.50	2.81	2.92	3.61	-	11.95	6.05	29.10	1	1	7.79	-	-	-0.02	16.91
135	3296-90-0		261.9	8.70	-0.04	<2.50	<2.70	2.29	0.85	-	1.14	4.32	40.46	2	2	-5.80	-	-	13.57	-
136	96-50-4		100.1	7.67	-0.08	<2.50	<2.70	0.38	0.83	0.38	3.40	2.68	38.91	1	1	2.33	5.44	-	4.94	-
137	115-77-5		136.1	7.61	-0.10	<2.50	<2.70	-1.96	-1.77	-	3.82	3.14	80.92	4	4	-5.78	-	-	13.55	-
138	110-98-5		134.2	10.5	-0.12	-	<2.70	-	-0.64	-	0.02	3.46	49.69	3	2	-6.42	-	-	14.19	-

Table1-1 トレーニングセット(化審法既存化学物質(全 144 物質)) [続き]

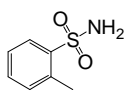
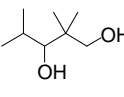
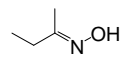
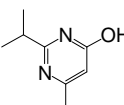
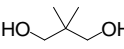
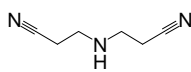
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [A]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [A ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
139	88-19-7		171.2	8.78	-0.15	<2.50	<2.70	0.84	0.92	-1.59	25.18	4.44	60.16	2	1	-2.41	10.18	-	10.17	-
140	144-19-4		146.2	8.93	-0.17	<2.50	<2.70	1.24	1.49	-	9.48	4.16	40.46	2	2	-7.04	-	-	14.81	-
141	96-29-7		87.1	7.56	-0.27	<2.50	<2.70	0.63	1.69	0.63	0.58	2.52	32.59	2	1	-4.74	12.51	-	12.40	-
142	2814-20-2		152.2	9.87	-0.38	<2.50	<2.70	0.55	2.21	-	0.12	4.39	46.01	3	1	-1.67	-	-	9.44	-
143	126-30-7		104.1	7.04	-0.42	<2.50	<2.70	0.12	0.16	-	9.37	2.82	40.46	2	2	-6.80	-	-	14.57	-
144	111-94-4		123.2	9.98	-0.48	<2.50	<2.70	-1.34	-1.15	-1.34	25.98	3.63	59.61	3	1	2.51	5.26	-	6.14	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質))

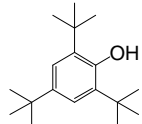
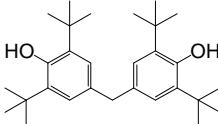
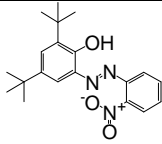
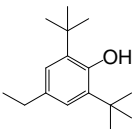
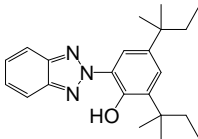
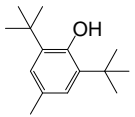
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
1	732-26-3		262.4	11.49	4.18	-	-	6.06	6.39	-	1.99	8.18	20.23	1	1	-4.84	-	-	12.61	-
2	118-82-1		424.7	15.65	4.01	-	-	-	8.99	-	4.73	13.04	40.46	2	2	-4.26	-	-	12.03	-
4	52184-14-2		355.4	15.12	3.63	-	-	-	8.55	-	38.44	10.10	90.77	3	1	-1.82	-	-	9.59	-
5	4130-42-1		234.4	11.56	3.41	4.73	4.81	5.60	5.52	-	1.95	7.33	20.23	1	1	-5.06	-	-	12.83	-
8	25973-55-1		351.5	15.03	3.14	-	-	-	7.25	-	0.57	10.64	50.94	3	1	-1.08	-	-	0.74	8.85
9	128-37-0		220.4	11.52	2.93	3.63	4.29	4.58	5.03	4.58	1.84	6.87	20.23	1	1	-6.23	14.00	-	12.76	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

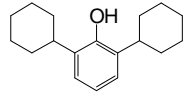
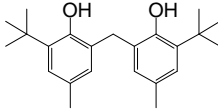
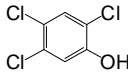
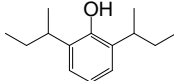
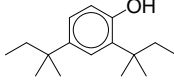
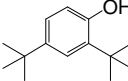
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
12	4821-19-6		258.4	14.86	2.84	-	-	-	6.30	-	1.83	8.01	20.23	1	1	-2.82	-	-	10.59	-
13	119-47-1		340.5	16.44	2.69	-	-	6.25	7.97	-	6.80	10.41	40.46	2	2	-3.56	-	-	11.33	-
14	95-95-4		197.4	9.5	2.64	2.55	<2.70	3.56	3.45	2.48	1.71	4.25	20.23	1	1	1.06	6.71	-	7.10	-
16	5510-99-6		206.3	13.49	2.55	3.40	3.80	4.36	4.56	-	1.54	6.54	20.23	1	1	-2.80	-	-	10.57	-
17	120-95-6		234.4	12.39	2.52	-	-	-	6.31	-	1.16	7.37	20.23	1	1	-3.23	-	-	11.00	-
19	96-76-4		206.3	11.13	2.30	4.28	4.61	5.19	5.33	5.19	1.16	6.42	20.23	1	1	-3.88	11.65	-	11.56	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
22	97-23-4		269.1	11.74	2.21	3.66	3.57	4.61	4.34	4.23	8.99	6.94	40.46	2	2	0.17	7.60	11.50	9.15	9.85
25	1879-09-0		178.3	10.24	2.13	3.10	3.76	4.08	4.52	4.08	1.85	5.55	20.23	1	1	-4.20	11.97	-	12.00	-
26	129-43-1		224.2	11.67	2.09	2.79	2.85	3.79	3.64	3.78	4.52	6.25	54.37	3	1	-3.71	11.48	-	7.15	-
27	70-30-4		406.9	13.6	2.07	-	-	6.74	6.92	4.63	5.46	8.69	40.46	2	2	2.12	5.65	10.1	6.49	-
28	599-64-4		212.3	11.40	2.06	-	3.34	-	4.12	-	1.45	6.71	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	10.62	-
30	87-86-5		266.3	9.51	2.03	4.21	3.99	5.12	4.74	2.12	1.54	5.06	20.23	1	1	3.02	4.75	-	4.68	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

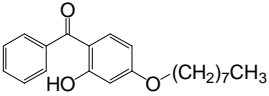
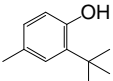
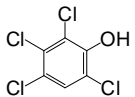
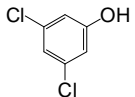
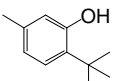
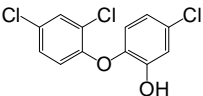
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
31	1843-05-6		326.4	22.46	2.00	-	-	-	6.96	-	7.33	9.85	46.53	3	1	0.18	-	-	7.59	-
35	2409-55-4		164.2	10.01	1.80	-	3.19	-	3.97	-	1.00	5.11	20.23	1	1	-3.95	11.72	-	11.64	-
36	58-90-2		231.9	9.5	1.78	3.49	3.31	4.45	4.09	1.92	3.13	4.67	20.23	1	1	2.55	5.22	-	5.64	-
37	591-35-5		163.0	8.64	1.75	2.52	<2.70	3.53	2.80	3.39	1.99	3.82	20.23	1	1	-0.41	8.18	-	8.04	-
39	88-60-8		164.2	10.44	1.71	3.13	3.19	4.11	3.97	-	1.56	5.11	20.23	1	1	-3.68	-	-	11.45	-
40	3380-34-5		289.5	13.65	1.69	3.82	3.90	4.76	4.66	-	4.29	6.95	29.46	1	1	-0.03	-	-	7.80	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

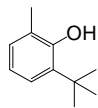
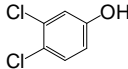
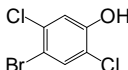
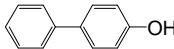

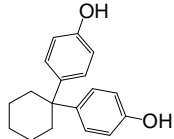
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
42	2219-82-1		164.2	10.24	1.63	-	3.19	-	3.97	-	1.36	5.11	20.23	1	1	-3.92	-	-	11.69	-
43	95-77-2		163.0	9	1.62	<2.50	<2.70	3.21	2.80	3.15	4.25	3.82	20.23	1	1	-0.81	8.58	-	8.56	-
44	1940-42-7		241.9	9.49	1.59	<2.50	2.90	2.42	3.69	-	1.87	4.54	20.23	1	1	0.79	-	-	6.98	-
46	92-69-3		170.2	12.07	1.57	<2.50	<2.70	3.36	3.28	3.35	1.40	5.38	20.23	1	1	-1.67	9.44	-	9.82	-
49	95-56-7		173.0	8.66	1.51	<2.50	<2.70	2.32	2.40	2.24	6.46	3.63	20.23	1	1	-0.67	8.44	-	8.43	-
50	843-55-0		268.4	12.17	1.47	-	4.26	-	5.00	-	5.30	8.08	40.46	2	2	-2.14	-	-	9.91	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

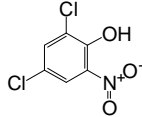
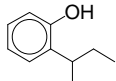
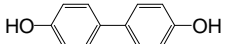
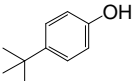
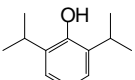

No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
51	609-89-2		208.0	9.29	1.43	<2.50	<2.70	1.90	3.20	-1.15	9.14	4.33	66.05	1	1	3.17	4.60	-	4.64	-
52	89-72-5		150.2	10.38	1.43	<2.50	<2.70	3.49	3.46	3.49	0.90	4.73	20.23	1	1	-2.91	10.68	-	10.36	-
53	92-88-6		186.2	12.67	1.42	<2.50	<2.70	2.75	2.80	-	0.68	5.52	40.46	2	2	-1.97	-	-	9.74	-
55	98-54-4		150.2	10.2	1.40	<2.50	<2.70	3.30	3.42	3.30	1.84	4.67	20.23	1	1	-2.54	10.31	-	10.13	-
58	2078-54-8		178.3	11.11	1.36	2.80	2.77	3.79	3.57	3.79	1.59	5.60	20.23	1	1	-3.33	11.10	-	11.00	-
60	95-57-8		128.6	8.32	1.34	<2.50	<2.70	2.15	2.16	2.08	5.76	3.38	20.23	1	1	-0.76	8.53	-	8.50	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

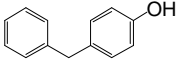
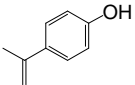
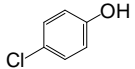
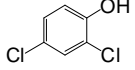
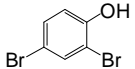
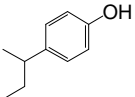
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
61	101-53-1		184.2	11.8	1.33	<2.50	2.74	3.47	3.54	0.93	1.48	5.85	20.23	1	1	-2.52	10.29	-	10.23	-
63	4286-23-1		134.2	10.14	1.27	<2.50	<2.70	2.90	2.96	2.90	1.22	4.20	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	9.80	-
65	106-48-9		128.6	8.98	1.22	<2.50	<2.70	2.39	2.16	2.38	2.20	3.38	20.23	1	1	-1.52	9.29	-	9.47	-
66	120-83-2		163.0	8.97	1.22	<2.50	<2.70	3.06	2.80	2.82	0.17	3.82	20.23	1	1	-0.11	7.88	-	8.05	-
68	615-58-7		251.9	9.29	1.19	<2.50	<2.70	3.22	3.29	3.03	5.26	4.32	20.23	1	1	0.05	7.72	-	7.86	-
69	99-71-8		150.2	11.07	1.18	<2.50	<2.70	2.64	3.46	2.64	1.85	4.72	20.23	1	1	-2.60	10.37	-	10.11	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

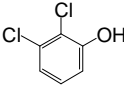
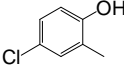
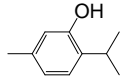
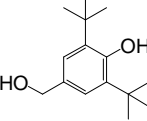
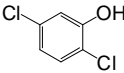
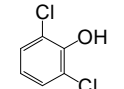
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
70	576-24-9		163.0	8.33	1.11	<2.50	<2.70	2.88	2.80	2.58	0.75	3.83	20.23	1	1	0.01	7.76	-	7.53	-
73	1570-64-5		142.6	9.01	1.09	<2.50	<2.70	3.12	2.70	3.11	3.16	3.83	20.23	1	1	-1.89	9.66	-	9.87	-
74	89-83-8		150.2	10.39	1.09	<2.50	2.72	3.30	3.52	3.30	1.54	4.69	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	10.59	-
76	88-26-6		236.4	11.58	1.04	-	2.76	-	3.56	-	6.90	7.05	40.46	2	2	-4.24	-	-	12.01	-
77	583-78-8		163.0	9.49	1.02	<2.50	<2.70	3.23	2.80	2.79	1.33	3.82	20.23	1	1	0.26	7.51	-	7.53	-
78	87-65-0		163.0	8.72	1.00	<2.50	<2.70	2.87	2.80	1.89	3.21	3.83	20.23	1	1	0.94	6.83	-	7.02	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

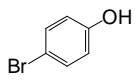
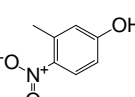
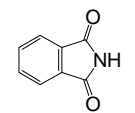
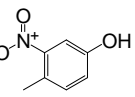
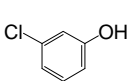
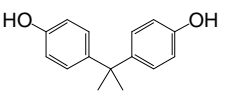
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
79	106-41-2		173.0	9.31	0.99	<2.50	<2.70	2.59	2.40	2.58	2.52	3.63	20.23	1	1	-1.44	9.21	-	9.34	-
80	2581-34-2		153.1	9.31	0.99	<2.50	<2.70	2.48	2.46	1.92	26.82	3.88	66.05	1	1	0.43	7.34	-	7.39	-
81	85-41-6		147.1	8.83	0.97	<2.50	<2.70	1.13	1.30	0.04	11.23	3.96	46.17	2	1	-0.53	8.30	-	10.39	-
83	2042-14-0		153.1	9.08	0.96	<2.50	<2.70	2.45	2.46	2.40	35.12	3.88	66.05	1	1	-0.85	8.62	-	8.66	-
85	108-43-0		128.6	8.32	0.96	<2.50	<2.70	2.49	2.16	2.46	5.10	3.38	20.23	1	1	-1.25	9.02	-	9.00	-
86	80-05-7		228.3	12.35	0.95	<2.50	2.85	3.44	3.64	3.43	4.06	6.86	40.46	2	2	-3.12	10.89	-	10.29	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

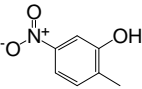
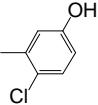
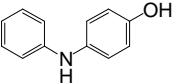
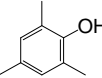
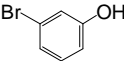
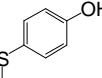
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
91	5428-54-6		153.1	9.51	0.89	<2.50	<2.70	2.56	2.46	2.50	42.35	3.88	66.05	1	1	-0.82	8.59	-	8.68	-
93	59-50-7		142.6	9	0.88	<2.50	<2.70	3.10	2.70	3.09	2.77	3.83	20.23	1	1	-1.70	9.47	-	9.63	-
94	122-37-2		185.2	12.37	0.85	<2.50	<2.70	2.80	2.46	-	2.33	5.71	32.26	1	2	6.01	-	-	1.76	10.46
95	527-60-6		136.2	8.92	0.83	-	<2.70	-	3.15	-	1.72	4.24	20.23	1	1	-3.14	10.91	-	10.97	-
97	591-20-8		173.0	8.65	0.81	<2.50	<2.70	2.71	2.40	2.69	0.12	3.63	20.23	1	1	-1.15	8.92	-	9.00	-
98	1073-72-9		140.2	10.37	0.81	<2.50	<2.70	2.03	2.11	2.02	0.11	4.07	20.23	1	1	-1.69	9.46	-	9.74	-

Table1-2 トレーニングセット(化審法既存化学物質(酸性物質 66 物質)) [続き]

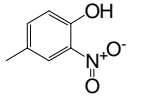
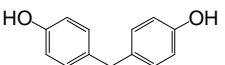
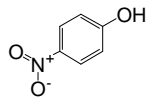
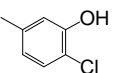
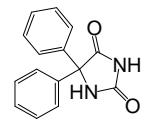
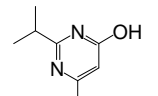
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
99	119-33-5		153.1	9.2	0.80	<2.50	<2.70	2.37	2.46	2.00	20.89	3.88	66.05	1	1	0.15	7.62	-	7.45	-
103	620-92-8		200.2	12.34	0.71	<2.50	<2.70	2.91	3.06	2.90	5.04	5.99	40.46	2	2	-1.86	9.63	10.32	9.91	-
109	100-02-7		139.1	9.27	0.60	<2.50	<2.70	1.95	1.91	1.22	27.69	3.42	66.05	1	1	0.65	7.12	-	7.23	-
114	615-74-7		142.6	9.21	0.45	<2.50	<2.70	2.90	2.70	-	1.34	3.83	20.23	1	1	-0.83	-	-	8.60	-
127	57-41-0		252.3	10.89	0.23	<2.50	<2.70	2.47	2.16	-	10.06	7.23	58.20	2	2	-0.51	-	-	-2.81	8.28
142	2814-20-2		152.2	9.87	-0.38	<2.50	<2.70	0.55	2.21	-	0.12	4.39	46.01	3	1	-1.67	-	-	9.44	-

Table1-3 トレーニングセット(化審法既存化学物質(塩基性物質 48 物質))

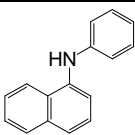
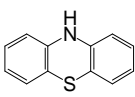
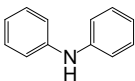
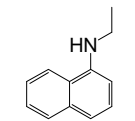
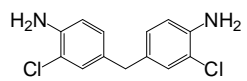
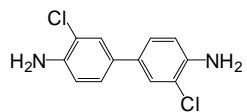
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
7	90-30-2		219.3	13.65	3.15	-	3.70	-	4.47	-	0.63	7.14	12.03	0	1	6.99	-	-	0.78	-
15	92-84-2		199.3	11.73	2.60	2.86	3.03	3.85	3.82	3.85	3.30	6.05	12.03	0	1	5.25	2.52	-	-1.87	-
18	122-39-4		169.2	11.64	2.32	2.55	<2.70	3.56	3.29	3.56	0.61	5.54	12.03	0	1	6.94	0.83	-	0.78	-
20	118-44-5		171.2	11.71	2.26	<2.50	<2.70	3.45	3.29	3.45	2.78	5.59	12.03	0	1	3.58	4.19	-	5.12	-
21	101-14-4		267.2	12.97	2.23	2.92	<2.70	3.91	3.47	-	1.80	7.20	52.04	0	2	4.44	-	-	3.33	-
23	91-94-1		253.1	13.12	2.19	2.65	<2.70	3.65	3.21	-	1.23	6.73	52.04	0	2	5.07	-	-	2.70	-

Table1-3 トレーニングセット(化審法既存化学物質(塩基性物質 48 物質)) [続き]

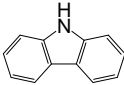
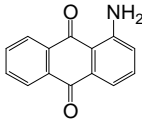
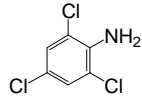
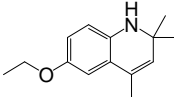
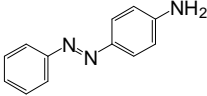
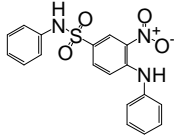
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
29	86-74-8		167.2	11.16	2.05	2.97	<2.70	3.96	3.23	-	1.44	5.40	15.79	0	1	10.17	-	-	-2.40	17.00
32	82-45-1		223.2	11.70	1.98	<2.50	2.73	3.31	3.53	3.30	3.29	6.42	60.16	2	1	6.53	1.24	-	-0.51	-
33	634-93-5		196.5	9.16	1.91	2.69	<2.70	3.69	3.01	3.69	3.44	4.39	26.02	0	1	7.80	-0.03	-	0.07	-
41	91-53-2		217.3	13.62	1.64	-	3.08	-	3.87	-	1.65	6.62	21.26	1	1	2.93	4.84	-	5.02	-
45	60-09-3		197.2	11.68	1.58	<2.50	<2.70	3.41	3.19	3.41	22.06	6.05	50.74	2	1	4.84	2.93	-	3.12	-
47	5124-25-4		369.4	14.03	1.57	3.41	3.56	4.37	4.33	-	31.17	9.87	104.02	2	2	11.84	-	-	-4.07	7.76

Table1-3 トレーニングセット(化審法既存化学物質(塩基性物質 48 物質)) [続き]

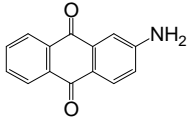
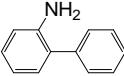
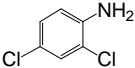
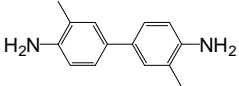

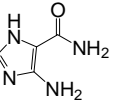
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
48	117-79-3		223.2	12.72	1.52	<2.50	<2.70	3.31	2.43	3.31	7.70	6.42	60.16	2	1	5.97	1.80	-	0.97	-
56	90-41-5		169.2	11.43	1.37	<2.50	<2.70	2.78	2.84	2.78	2.13	5.51	26.02	0	1	3.95	3.82	-	3.81	-
57	554-00-7		162.0	9.17	1.36	<2.50	<2.70	2.88	2.37	2.88	6.22	3.96	26.02	0	1	5.74	2.04	-	2.02	-
59	119-93-7		212.3	13.07	1.35	<2.50	<2.70	2.37	3.02	2.36	0.96	6.66	52.04	0	2	4.47	3.30	4.50	4.59	-
64	134-32-7		143.2	9.4	1.26	<2.50	<2.70	2.25	2.25	2.25	2.47	4.64	26.02	0	1	3.84	3.93	-	4.21	-
71	72-40-2		126.1	8.76	1.10	-	<2.70	-	-1.47	-	0.91	3.06	97.79	3	4	3.75	4.02	-	4.74	14.79

Table1-3 トレーニングセット(化審法既存化学物質(塩基性物質 48 物質)) [続き]

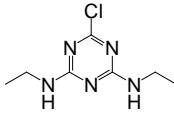
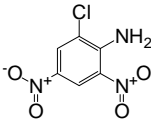
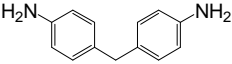

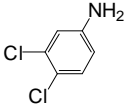
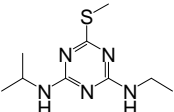
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
75	122-34-9		201.7	13.66	1.08	<2.50	<2.70	2.18	2.40	2.18	15.29	5.13	62.73	3	2	5.97	1.80	-	2.71	-
82	3531-19-9		217.6	9.77	0.97	-	<2.70	-	2.48	-	39.11	4.50	117.66	0	1	14.45	-6.68	-	-6.83	-
84	101-77-9		198.3	13.14	0.96	<2.50	<2.70	1.62	2.18	1.61	8.66	6.24	52.04	0	2	2.59	5.19	-	5.32	-
87	75-64-9		73.1	6.51	0.94	<2.50	<2.70	0.40	0.72	-2.34	2.14	2.28	26.02	1	1	-2.97	10.74	-	10.68	-
88	95-76-1		162.0	9.14	0.93	<2.50	<2.70	2.69	2.37	2.69	10.59	3.96	26.02	0	1	4.80	2.97	-	2.90	-
90	834-12-8		227.3	13.66	0.91	<2.50	<2.70	2.98	3.32	2.98	3.77	6.26	62.73	3	2	3.77	4.00	-	3.71	-

Table1-3 トレーニングセット(化審法既存化学物質(塩基性物質 48 物質)) [続き]

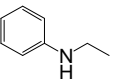
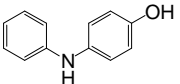
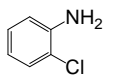
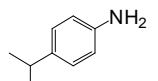
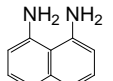
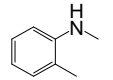
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
92	103-69-5		121.2	9.31	0.88	<2.50	<2.70	2.16	2.11	2.16	2.31	3.98	12.03	0	1	2.77	5.00	-	5.12	-
94	122-37-2		185.2	12.37	0.85	<2.50	<2.70	2.80	2.46	-	2.33	5.71	32.26	1	2	6.01	-	-	1.76	10.46
96	95-51-2		127.6	8.32	0.82	<2.50	<2.70	1.90	1.72	1.90	3.13	3.51	26.02	0	1	5.19	2.58	-	2.65	-
100	99-88-7		185.2	10.30	0.80	<2.50	<2.70	2.40	2.53	2.40	2.04	4.37	26.02	0	1	2.92	4.85	-	5.01	-
102	479-27-6		158.2	9.4	0.74	<2.50	<2.70	2.21	1.34	2.21	6.78	4.90	52.04	0	2	3.79	3.98	-	4.46	-
104	611-21-2		121.2	9.37	0.68	<2.50	<2.70	2.06	2.17	2.05	1.98	3.97	12.03	0	1	3.16	4.61	-	4.73	-

Table1-3 トレーニングセット(化審法既存化学物質(塩基性物質 48 物質)) [続き]

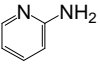
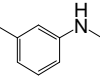
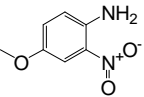
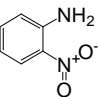
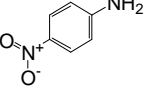
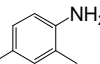
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
106	504-29-0		94.1	7.94	0.65	<2.50	<2.70	0.55	0.53	0.55	3.20	2.85	38.91	1	1	15.37	-7.60	6.79	6.67	-
107	696-44-6		121.2	10.04	0.65	<2.50	<2.70	2.19	2.17	2.19	1.79	3.96	12.03	0	1	2.92	4.85	-	5.00	-
110	96-96-8		168.2	10.32	0.54	<2.50	<2.70	1.94	2.10	1.94	18.57	4.20	81.07	1	1	6.98	0.80	-	0.96	-
111	88-74-4		138.1	8.55	0.52	<2.50	<2.70	1.85	2.02	1.85	27.82	3.57	71.84	0	1	8.07	-0.30	-	-0.23	-
112	100-01-6		138.1	9.43	0.50	<2.50	<2.70	1.42	1.47	1.42	53.59	3.56	71.84	0	1	6.79	0.98	-	1.01	-
113	95-68-1		121.2	8.99	0.50	<2.50	<2.70	1.68	2.17	1.68	2.67	3.91	26.02	0	1	2.92	4.85	-	4.89	-

Table1-3 トレーニングセット(化審法既存化学物質(塩基性物質 48 物質)) [続き]

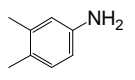
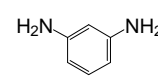
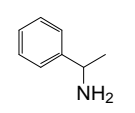
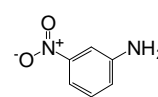
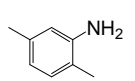
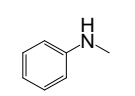
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
115	95-64-7		121.2	9.01	0.42	-	<2.70	-	2.17	-	2.11	3.91	26.02	0	1	2.60	5.17	-	5.15	-
117	108-45-2		108.1	8.63	0.38	<2.50	<2.70	-0.36	-0.39	-0.36	0.95	3.28	52.04	0	2	5.36	2.41	5.035	4.88	-
118	98-84-0		121.2	9.31	0.36	-	<2.70	-	1.49	-	1.99	3.94	26.02	1	1	-1.45	9.22	-	9.04	-
120	99-09-2		138.1	9.2	0.34	<2.50	<2.70	1.46	1.47	1.45	35.45	3.56	71.84	0	1	5.36	2.41	-	2.46	-
122	95-78-3		121.2	9.04	0.30	<2.50	<2.70	1.87	2.17	1.87	1.76	3.91	26.02	0	1	3.23	4.54	-	4.58	-
124	100-61-8		107.2	9.38	0.29	<2.50	<2.70	1.66	1.62	1.66	1.69	3.52	12.03	0	1	2.88	4.90	-	4.70	-

Table1-3 トレーニングセット(化審法既存化学物質(塩基性物質 48 物質)) [続き]

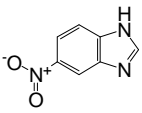

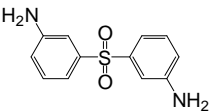
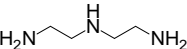

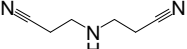
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
129	94-52-0		163.1	10.36	0.11	<2.50	<2.70	1.64	1.05	1.61	63.26	4.15	74.50	2	2	4.35	3.42	10.86	10.95	-
130	95-14-7		119.1	8.19	0.10	<2.50	<2.70	1.44	1.17	1.44	13.34	3.43	41.57	3	2	6.17	1.60	8.44	8.38	-
132	599-61-1		248.3	11.29	0.01	-	<2.70	-	0.77	-	16.93	6.77	86.18	2	2	4.61	-	-	3.16	-
133	111-40-0		103.2	10.29	0.01	-	<2.70	-	-2.13	-	4.71	2.94	64.07	3	3	-1.26	9.03	9.82	9.97	-
136	96-50-4		100.1	7.67	-0.08	<2.50	<2.70	0.38	0.83	0.38	3.40	2.68	38.91	1	1	2.33	5.44	-	4.94	-
144	111-94-4		123.2	9.98	-0.48	<2.50	<2.70	-1.34	-1.15	-1.34	25.98	3.63	59.61	3	1	2.51	5.26	-	6.14	-

Table1-4 トレーニングセット(化審法既存化学物質(中性物質 33 物質))

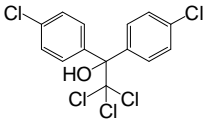
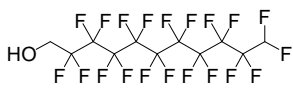
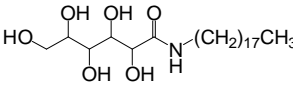
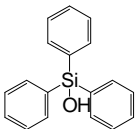
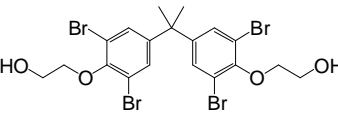
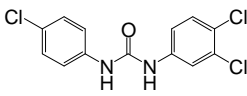
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
3	115-32-2		370.5	13.12	3.78	4.19	5.12	5.10	5.81	-	1.23	8.56	20.23	1	1	-2.93	-	-	10.70	-
6	307-70-0		532.1	15.23	3.33	-	-	-	8.36	-	9.84	5.30	20.23	1	1	-5.12	-	-	12.89	-
10	18375-66-1		447.6	34.41	2.86	-	4.67	-	5.39	-	7.27	12.56	130.25	6	6	8.66	-	-	-0.89	12.47
11	791-31-1		276.4	12.07	2.85	4.04	4.04	4.96	4.79	-	3.18	9.24	20.23	1	1	-5.62	-	-	13.39	-
24	4162-45-2		632.0	15.9	2.16	4.05	-	4.97	6.78	-	20.29	12.03	58.92	4	2	-5.99	-	-	13.76	-
34	101-20-2		315.6	15.12	1.91	<2.50	4.15	2.91	4.90	-	18.47	7.84	41.13	1	2	8.11	-	-	-0.34	12.77

Table1-4 トレーニングセット(化審法既存化学物質(中性物質 33 物質)) [続き]

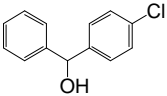
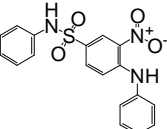
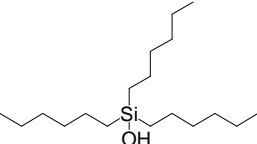
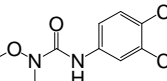
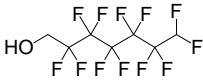
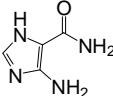
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
38	119-56-2		218.7	12.15	1.74	2.61	<2.70	3.61	3.35	-	0.66	6.34	20.23	1	1	-5.57	-	-	13.34	-
47	5124-25-4		369.4	14.03	1.57	3.41	3.56	4.37	4.33	-	31.17	9.87	104.02	2	2	11.84	-	-	-4.07	7.76
54	60782-58-3		300.6	17.35	1.41	-	-	-	8.51	-	2.53	10.01	20.23	1	1	-7.69	-	-	15.46	-
62	330-55-2		249.1	13.13	1.27	<2.50	<2.70	3.14	2.91	-	26.53	6.00	41.57	2	1	8.82	-	-	-1.05	12.13
67	335-99-9		332.1	12.59	1.21	<2.50	3.74	3.46	4.50	-	6.38	3.60	20.23	1	1	-5.12	-	-	12.89	-
71	72-40-2		126.1	8.76	1.10	-	<2.70	-	-1.47	-	0.91	3.06	97.79	3	4	3.75	4.02	-	4.74	14.79

Table1-4 トレーニングセット(化審法既存化学物質(中性物質 33 物質)) [続き]

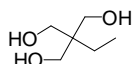
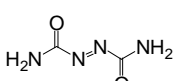
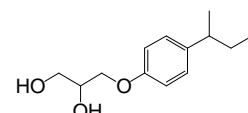
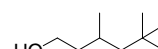
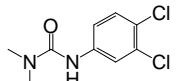
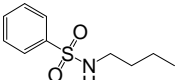
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
72	77-99-6		134.2	8.65	1.09	-	<2.70	-	0.19	-	8.59	3.46	60.69	3	3	-6.24	-	-	14.01	-
89	123-77-3		116.1	9.44	0.92	-	<2.70	-	-3.89	-	12.06	2.37	110.90	4	2	9.21	-	-	-1.44	11.90
101	-		224.3	15.29	0.75	-	<2.70	-	2.81	-	13.69	6.45	49.69	3	2	-5.76	-	-	13.53	-
105	3452-97-9		144.3	11.03	0.67	<2.50	<2.70	3.42	3.11	-	3.05	4.47	20.23	1	1	-7.36	-	-	15.13	-
108	330-54-1		233.1	12.84	0.62	<2.50	<2.70	2.84	2.67	-	20.61	5.81	32.34	1	1	8.86	-	-	-1.09	13.55
116	3622-84-2		213.3	14.10	0.39	-	<2.70	-	2.31	-	26.22	5.91	46.17	2	1	-3.51	11.28	-	11.62	-

Table1-4 トレーニングセット(化審法既存化学物質(中性物質 33 物質)) [続き]

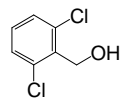
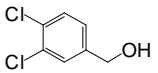
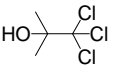
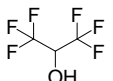
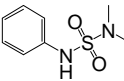
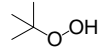
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
119	15258-73-8		177.0	8.71	0.36	<2.50	<2.70	1.98	2.36	-	6.03	4.32	20.23	1	1	-5.80	-	-	13.57	-
121	1805-32-9		177.0	9.69	0.30	<2.50	<2.70	2.74	2.36	-	0.81	4.32	20.23	1	1	-5.93	-	-	13.70	-
123	57-15-8		177.5	7.64	0.30	<2.50	<2.70	1.88	2.09	-	3.68	3.55	20.23	1	1	-5.10	-	-	12.87	-
125	920-66-1		168.0	7.45	0.26	<2.50	<2.70	1.66	1.11	1.65	7.87	1.76	20.23	1	1	-1.62	9.39	-	9.75	-
126	-		200.3	10.09	0.26	<2.50	<2.70	1.67	1.15	-	21.80	5.25	49.69	2	1	8.56	-	-	-0.79	7.44
128	75-91-2		90.1	6.96	0.15	-	<2.70	-	0.94	-	4.50	2.35	29.46	2	1	-4.77	12.54	-	12.69	-

Table1-4 トレーニングセット(化審法既存化学物質(中性物質 33 物質)) [続き]

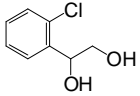
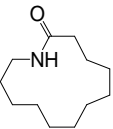
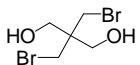
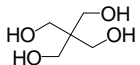
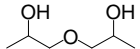
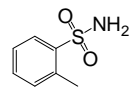
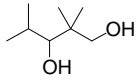
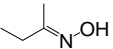

No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
131	59365-60-5		172.6	9.98	0.07	<2.50	<2.70	1.17	1.08	-	9.61	4.48	40.46	2	2	-5.47	-	-	13.24	-
134	947-04-6		197.3	9.88	0.01	<2.50	2.81	2.92	3.61	-	11.95	6.05	29.10	1	1	7.79	-	-	-0.02	16.91
135	3296-90-0		261.9	8.70	-0.04	<2.50	<2.70	2.29	0.85	-	1.14	4.32	40.46	2	2	-5.80	-	-	13.57	-
137	115-77-5		136.1	7.61	-0.10	<2.50	<2.70	-1.96	-1.77	-	3.82	3.14	80.92	4	4	-5.78	-	-	13.55	-
138	110-98-5		134.2	10.5	-0.12	-	<2.70	-	-0.64	-	0.02	3.46	49.69	3	2	-6.42	-	-	14.19	-
139	88-19-7		171.2	8.78	-0.15	<2.50	<2.70	0.84	0.92	-1.59	25.18	4.44	60.16	2	1	-2.41	10.18	-	10.17	-

Table1-4 トレーニングセット(化審法既存化学物質(中性物質 33 物質)) [続き]

No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
140	144-19-4		146.2	8.93	-0.17	<2.50	<2.70	1.24	1.49	-	9.48	4.16	40.46	2	2	-7.04	-	-	14.81	-
141	96-29-7		87.1	7.56	-0.27	<2.50	<2.70	0.63	1.69	0.63	0.58	2.52	32.59	2	1	-4.74	12.51	-	12.40	-
143	126-30-7		104.1	7.04	-0.42	<2.50	<2.70	0.12	0.16	-	9.37	2.82	40.46	2	2	-6.80	-	-	14.57	-

2. Read-across による生物濃縮性予測の検討を行ったカテゴリⅡ-B に該当する物質のリスト

Table2-1 カテゴリⅡ-B に該当するイオン存在割合 10%未満のフェノール(既存化学物質 39 物質)

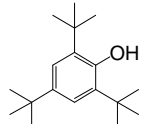
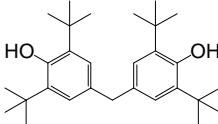
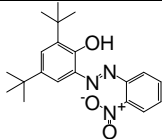
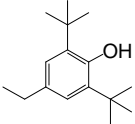
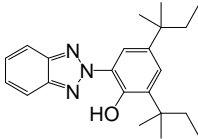
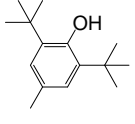
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [A]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [A ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
1	732-26-3		262.4	11.49	4.18	-	-	6.06	6.39	-	1.99	8.18	20.23	1	1	1.06	-	-	12.61	-
2	118-82-1		424.7	15.65	4.01	-	-	-	8.99	-	4.73	13.04	40.46	2	2	-4.26	-	-	12.03	-
4	52184-14-2		355.4	15.12	3.63	-	-	-	8.55	-	38.44	10.10	90.77	3	1	-1.82	-	-	9.59	-
5	4130-42-1		234.4	11.56	3.41	4.73	4.81	5.60	5.52	-	1.95	7.33	20.23	1	1	-5.06	-	-	12.83	-
8	25973-55-1		351.5	15.03	3.14	-	-	-	7.25	-	0.57	10.64	50.94	3	1	-1.08	-	-	0.74	8.85
9	128-37-0		220.4	11.52	2.93	3.63	4.29	4.58	5.03	4.58	1.84	6.87	20.23	1	1	-6.23	14.00	-	12.76	-

Table2-1 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満のフェノール(既存化学物質39物質) [続き]

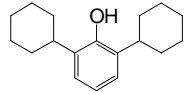
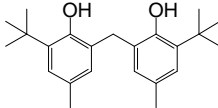
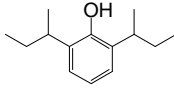
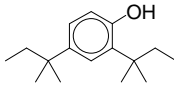
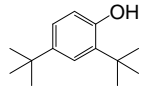
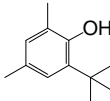
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
12	4821-19-6		258.4	14.86	2.84	-	-	-	6.30	-	1.83	8.01	20.23	1	1	-2.82	-	-	10.59	-
13	119-47-1		340.5	16.44	2.69	-	-	6.25	7.97	-	6.80	10.41	40.46	2	2	-3.56	-	-	11.33	-
16	5510-99-6		206.3	13.49	2.55	3.40	3.80	4.36	4.56	-	1.54	6.54	20.23	1	1	-2.80	-	-	10.57	-
17	120-95-6		234.4	12.39	2.52	-	-	-	6.31	-	1.16	7.37	20.23	1	1	-3.23	-	-	11.00	-
19	96-76-4		206.3	11.13	2.30	4.28	4.61	5.19	5.33	5.19	1.16	6.42	20.23	1	1	-3.88	11.65	-	11.56	-
25	1879-09-0		178.3	10.24	2.13	3.10	3.76	4.08	4.52	4.08	1.85	5.55	20.23	1	1	-4.20	11.97	-	12.00	-

Table2-1 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満のフェノール(既存化学物質39物質) [続き]

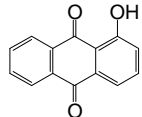
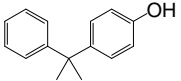
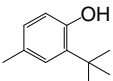
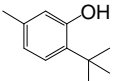
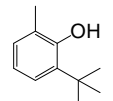
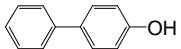
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
26	129-43-1		224.2	11.67	2.09	2.79	2.85	3.79	3.64	3.78	4.52	6.25	54.37	3	1	-3.71	11.48	-	7.15	-
28	599-64-4		212.3	11.40	2.06	-	3.34	-	4.12	-	1.45	6.71	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	10.62	-
35	2409-55-4		164.2	10.01	1.80	-	3.19	-	3.97	-	1.00	5.11	20.23	1	1	-3.95	11.72	-	11.64	-
39	88-60-8		164.2	10.44	1.71	3.13	3.19	4.11	3.97	-	1.56	5.11	20.23	1	1	-3.68	-	-	11.45	-
42	2219-82-1		164.2	10.24	1.63	-	3.19	-	3.97	-	1.36	5.11	20.23	1	1	-3.92	-	-	11.69	-
46	92-69-3		170.2	12.07	1.57	<2.50	<2.70	3.36	3.28	3.35	1.40	5.38	20.23	1	1	-1.67	9.44	-	9.82	-

Table2-1 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満のフェノール(既存化学物質39物質) [続き]

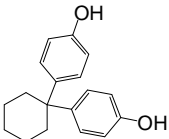
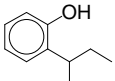
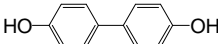
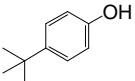
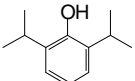
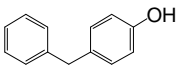
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
50	843-55-0		268.4	12.17	1.47	-	4.26	-	5.00	-	5.30	8.08	40.46	2	2	-2.14	-	-	9.91	-
52	89-72-5		150.2	10.38	1.43	<2.50	<2.70	3.49	3.46	3.49	0.90	4.73	20.23	1	1	-2.91	10.68	-	10.36	-
53	92-88-6		186.2	12.67	1.42	<2.50	<2.70	2.75	2.80	-	0.68	5.52	40.46	2	2	-1.97	-	-	9.74	-
55	98-54-4		150.2	10.2	1.40	<2.50	<2.70	3.30	3.42	3.30	1.84	4.67	20.23	1	1	-2.54	10.31	-	10.13	-
58	2078-54-8		178.3	11.11	1.36	2.80	2.77	3.79	3.57	3.79	1.59	5.60	20.23	1	1	-3.33	11.10	-	11.00	-
61	101-53-1		184.2	11.8	1.33	<2.50	2.74	3.47	3.54	0.93	1.48	5.85	20.23	1	1	-2.52	10.29	-	10.23	-

Table2-1 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満のフェノール(既存化学物質39物質) [続き]

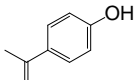
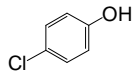
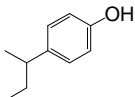
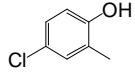
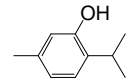
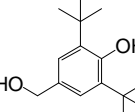
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
63	4286-23-1		134.2	10.14	1.27	<2.50	<2.70	2.90	2.96	2.90	1.22	4.20	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	9.80	-
65	106-48-9		128.6	8.98	1.22	<2.50	<2.70	2.39	2.16	2.38	2.20	3.38	20.23	1	1	-1.52	9.29	-	9.47	-
69	99-71-8		150.2	11.07	1.18	<2.50	<2.70	2.64	3.46	2.64	1.85	4.72	20.23	1	1	-2.60	10.37	-	10.11	-
73	1570-64-5		142.6	9.01	1.09	<2.50	<2.70	3.12	2.70	3.11	3.16	3.83	20.23	1	1	-1.89	9.66	-	9.87	-
74	89-83-8		150.2	10.39	1.09	<2.50	2.72	3.30	3.52	3.30	1.54	4.69	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	10.59	-
76	88-26-6		236.4	11.58	1.04	-	2.76	-	3.56	-	6.90	7.05	40.46	2	2	-4.24	-	-	12.01	-

Table2-1 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満のフェノール(既存化学物質39物質) [続き]

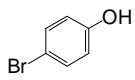
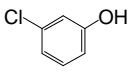
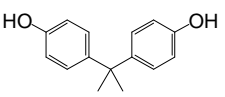
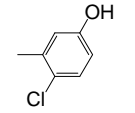
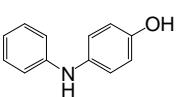
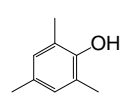
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
79	106-41-2		173.0	9.31	0.99	<2.50	<2.70	2.59	2.40	2.58	2.52	3.63	20.23	1	1	-1.44	9.21	-	9.34	-
85	108-43-0		128.6	8.32	0.96	<2.50	<2.70	2.49	2.16	2.46	5.10	3.38	20.23	1	1	-1.25	9.02	-	9.00	-
86	80-05-7		228.3	12.35	0.95	<2.50	2.85	3.44	3.64	3.43	4.06	6.86	40.46	2	2	-3.12	10.89	-	10.29	-
93	59-50-7		142.6	9	0.88	<2.50	<2.70	3.10	2.70	3.09	2.77	3.83	20.23	1	1	-1.70	9.47	-	9.63	-
94	122-37-2		185.2	12.37	0.85	<2.50	<2.70	2.80	2.46	-	2.33	5.71	32.26	1	2	-2.69	-	-	1.76	10.46
95	527-60-6		136.2	8.92	0.83	-	<2.70	-	3.15	-	1.72	4.24	20.23	1	1	-3.14	10.91	-	10.97	-

Table2-1 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満のフェノール(既存化学物質39物質) [続き]

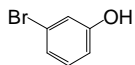
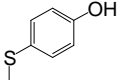
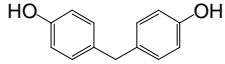
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
97	591-20-8		173.0	8.65	0.81	<2.50	<2.70	2.71	2.40	2.69	0.12	3.63	20.23	1	1	-1.15	8.92	-	9.00	-
98	1073-72-9		140.2	10.37	0.81	<2.50	<2.70	2.03	2.11	2.02	0.11	4.07	20.23	1	1	-1.69	9.46	-	9.74	-
103	620-92-8		200.2	12.34	0.71	<2.50	<2.70	2.91	3.06	2.90	5.04	5.99	40.46	2	2	-1.86	9.63	10.32	9.91	-

Table2-2 カテゴリーⅡ-B に該当するイオン存在割合 10%以上のフェノール(既存化学物質 24 物質)

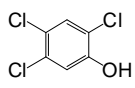
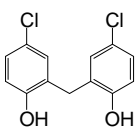
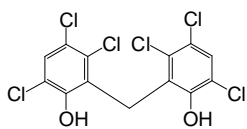
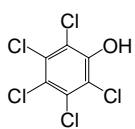
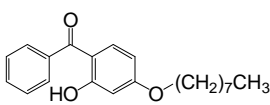
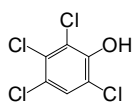
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
14	95-95-4		197.4	9.5	2.64	2.55	<2.70	3.56	3.45	2.48	1.71	4.25	20.23	1	1	1.06	6.71	-	7.10	-
22	97-23-4		269.1	11.74	2.21	3.66	3.57	4.61	4.34	4.23	8.99	6.94	40.46	2	2	0.17	7.60	11.50	9.15	9.85
27	70-30-4		406.9	13.6	2.07	-	-	6.74	6.92	4.63	5.46	8.69	40.46	2	2	2.12	5.65	10.1	6.49	-
30	87-86-5		266.3	9.51	2.03	4.21	3.99	5.12	4.74	2.12	1.54	5.06	20.23	1	1	3.02	4.75	-	4.68	-
31	1843-05-6		326.4	22.46	2.00	-	-	-	6.96	-	7.33	9.85	46.53	3	1	0.18	-	-	7.59	-
36	58-90-2		231.9	9.5	1.78	3.49	3.31	4.45	4.09	1.92	3.13	4.67	20.23	1	1	2.55	5.22	-	5.64	-

Table2-2 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%以上のフェノール(既存化学物質24物質) [続き]

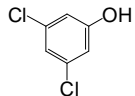
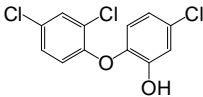
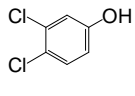
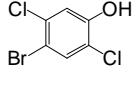
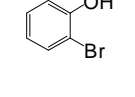
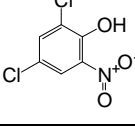
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
37	591-35-5		163.0	8.64	1.75	2.52	<2.70	3.53	2.80	3.39	1.99	3.82	20.23	1	1	-0.41	8.18	-	8.04	-
40	3380-34-5		289.5	13.65	1.69	3.82	3.90	4.76	4.66	-	4.29	6.95	29.46	1	1	-0.03	-	-	7.80	-
43	95-77-2		163.0	9	1.62	<2.50	<2.70	3.21	2.80	3.15	4.25	3.82	20.23	1	1	-0.81	8.58	-	8.56	-
44	1940-42-7		241.9	9.49	1.59	<2.50	2.90	2.42	3.69	-	1.87	4.54	20.23	1	1	0.79	-	-	6.98	-
49	95-56-7		173.0	8.66	1.51	<2.50	<2.70	2.32	2.40	2.24	6.46	3.63	20.23	1	1	-0.67	8.44	-	8.43	-
51	609-89-2		208.0	9.29	1.43	<2.50	<2.70	1.90	3.20	-1.15	9.14	4.33	66.05	1	1	3.17	4.60	-	4.64	-

Table2-2 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%以上のフェノール(既存化学物質24物質) [続き]


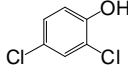
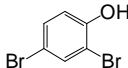
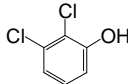
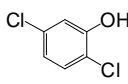
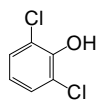
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
60	95-57-8		128.6	8.32	1.34	<2.50	<2.70	2.15	2.16	2.08	5.76	3.38	20.23	1	1	-0.76	8.53	-	8.50	-
66	120-83-2		163.0	8.97	1.22	<2.50	<2.70	3.06	2.80	2.82	0.17	3.82	20.23	1	1	-0.11	7.88	-	8.05	-
68	615-58-7		251.9	9.29	1.19	<2.50	<2.70	3.22	3.29	3.03	5.26	4.32	20.23	1	1	0.05	7.72	-	7.86	-
70	576-24-9		163.0	8.33	1.11	<2.50	<2.70	2.88	2.80	2.58	0.75	3.83	20.23	1	1	0.01	7.76	-	7.53	-
77	583-78-8		163.0	9.49	1.02	<2.50	<2.70	3.23	2.80	2.79	1.33	3.82	20.23	1	1	0.26	7.51	-	7.53	-
78	87-65-0		163.0	8.72	1.00	<2.50	<2.70	2.87	2.80	1.89	3.21	3.83	20.23	1	1	0.94	6.83	-	7.02	-

Table2-2 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%以上のフェノール(既存化学物質24物質) [続き]

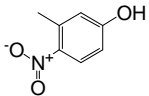
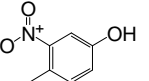
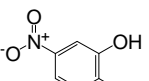
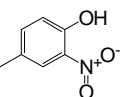
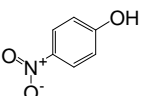
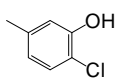
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
80	2581-34-2		153.1	9.31	0.99	<2.50	<2.70	2.48	2.46	1.92	26.82	3.88	66.05	1	1	0.43	7.34	-	7.39	-
83	2042-14-0		153.1	9.08	0.96	<2.50	<2.70	2.45	2.46	2.40	35.12	3.88	66.05	1	1	-0.85	8.62	-	8.66	-
91	5428-54-6		153.1	9.51	0.89	<2.50	<2.70	2.56	2.46	2.50	42.35	3.88	66.05	1	1	-0.82	8.59	-	8.68	-
99	119-33-5		153.1	9.2	0.80	<2.50	<2.70	2.37	2.46	2.00	20.89	3.88	66.05	1	1	0.15	7.62	-	7.45	-
109	100-02-7		139.1	9.27	0.60	<2.50	<2.70	1.95	1.91	1.22	27.69	3.42	66.05	1	1	0.65	7.12	-	7.23	-
114	615-74-7		142.6	9.21	0.45	<2.50	<2.70	2.90	2.70	-	1.34	3.83	20.23	1	1	-0.83	-	-	8.60	-

Table2-3 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax<11Åのフェノール(既存化学物質16物質)

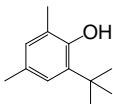
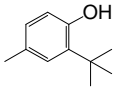
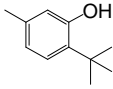
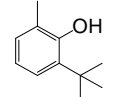
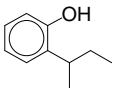
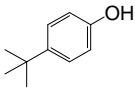
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
25	1879-09-0		178.3	10.24	2.13	3.10	3.76	4.08	4.52	4.08	1.85	5.55	20.23	1	1	1.06	11.97	-	12.00	-
35	2409-55-4		164.2	10.01	1.80	-	3.19	-	3.97	-	1.00	5.11	20.23	1	1	-3.95	11.72	-	11.64	-
39	88-60-8		164.2	10.44	1.71	3.13	3.19	4.11	3.97	-	1.56	5.11	20.23	1	1	-3.68	-	-	11.45	-
42	2219-82-1		164.2	10.24	1.63	-	3.19	-	3.97	-	1.36	5.11	20.23	1	1	-3.92	-	-	11.69	-
52	89-72-5		150.2	10.38	1.43	<2.50	<2.70	3.49	3.46	3.49	0.90	4.73	20.23	1	1	-2.91	10.68	-	10.36	-
55	98-54-4		150.2	10.2	1.40	<2.50	<2.70	3.30	3.42	3.30	1.84	4.67	20.23	1	1	-2.54	10.31	-	10.13	-

Table2-3 カテゴリーII-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax<11Åのフェノール(既存化学物質16物質) [続き]

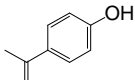
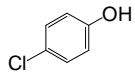
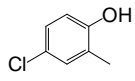
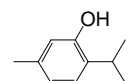
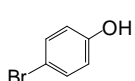
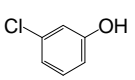
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
63	4286-23-1		134.2	10.14	1.27	<2.50	<2.70	2.90	2.96	2.90	1.22	4.20	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	9.80	-
65	106-48-9		128.6	8.98	1.22	<2.50	<2.70	2.39	2.16	2.38	2.20	3.38	20.23	1	1	-1.52	9.29	-	9.47	-
73	1570-64-5		142.6	9.01	1.09	<2.50	<2.70	3.12	2.70	3.11	3.16	3.83	20.23	1	1	-1.89	9.66	-	9.87	-
74	89-83-8		150.2	10.39	1.09	<2.50	2.72	3.30	3.52	3.30	1.54	4.69	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	10.59	-
79	106-41-2		173.0	9.31	0.99	<2.50	<2.70	2.59	2.40	2.58	2.52	3.63	20.23	1	1	-1.44	9.21	-	9.34	-
85	108-43-0		128.6	8.32	0.96	<2.50	<2.70	2.49	2.16	2.46	5.10	3.38	20.23	1	1	-1.25	9.02	-	9.00	-

Table2-3 カテゴリーII-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax<11Åのフェノール(既存化学物質16物質) [続き]

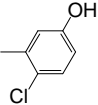

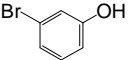
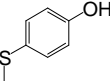
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
93	59-50-7		142.6	9	0.88	<2.50	<2.70	3.10	2.70	3.09	2.77	3.83	2023	1	1	-1.70	9.47	-	9.63	-
95	527-60-6		136.2	8.92	0.83	-	<2.70	-	3.15	-	1.72	4.24	2023	1	1	-3.14	10.91	-	10.97	-
97	591-20-8		173.0	8.65	0.81	<2.50	<2.70	2.71	2.40	2.69	0.12	3.63	2023	1	1	-1.15	8.92	-	9.00	-
98	1073-72-9		140.2	10.37	0.81	<2.50	<2.70	2.03	2.11	2.02	0.11	4.07	2023	1	1	-1.69	9.46	-	9.74	-

Table2-4 カテゴリーII-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax≥11Åのフェノール(既存化学物質23物質)

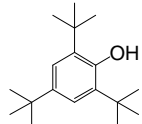
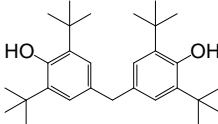
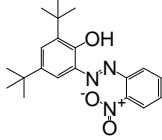
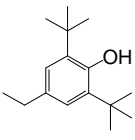
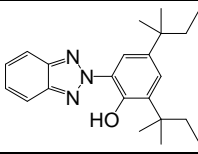
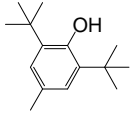
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
1	732-26-3		262.4	11.49	4.18	-	-	6.06	6.39	-	1.99	8.18	20.23	1	1	1.06	-	-	12.61	-
2	118-82-1		424.7	15.65	4.01	-	-	-	8.99	-	4.73	13.04	40.46	2	2	-4.26	-	-	12.03	-
4	52184-14-2		355.4	15.12	3.63	-	-	-	8.55	-	38.44	10.10	90.77	3	1	-1.82	-	-	9.59	-
5	4130-42-1		234.4	11.56	3.41	4.73	4.81	5.60	5.52	-	1.95	7.33	20.23	1	1	-5.06	-	-	12.83	-
8	25973-55-1		351.5	15.03	3.14	-	-	-	7.25	-	0.57	10.64	50.94	3	1	-1.08	-	-	0.74	8.85
9	128-37-0		220.4	11.52	2.93	3.63	4.29	4.58	5.03	4.58	1.84	6.87	20.23	1	1	-6.23	14.00	-	12.76	-

Table2-4 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax \geq 11Åのフェノール(既存化学物質23物質)[続き]

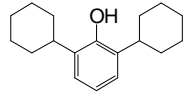
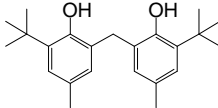
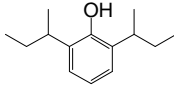
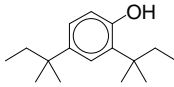
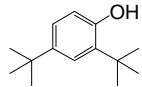
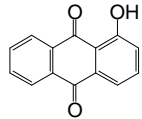
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
12	4821-19-6		258.4	14.86	2.84	-	-	-	6.30	-	1.83	8.01	20.23	1	1	-2.82	-	-	10.59	-
13	119-47-1		340.5	16.44	2.69	-	-	6.25	7.97	-	6.80	10.41	40.46	2	2	-3.56	-	-	11.33	-
16	5510-99-6		206.3	13.49	2.55	3.40	3.80	4.36	4.56	-	1.54	6.54	20.23	1	1	-2.80	-	-	10.57	-
17	120-95-6		234.4	12.39	2.52	-	-	-	6.31	-	1.16	7.37	20.23	1	1	-3.23	-	-	11.00	-
19	96-76-4		206.3	11.13	2.30	4.28	4.61	5.19	5.33	5.19	1.16	6.42	20.23	1	1	-3.88	11.65	-	11.56	-
26	129-43-1		224.2	11.67	2.09	2.79	2.85	3.79	3.64	3.78	4.52	6.25	54.37	3	1	-3.71	11.48	-	7.15	-

Table2-4 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax \geq 11Åのフェノール(既存化学物質23物質)[続き]

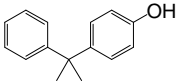
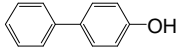
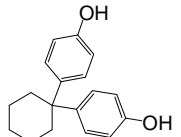
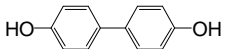
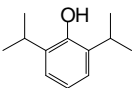
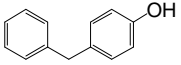
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
28	599-64-4		212.3	11.40	2.06	-	3.34	-	4.12	-	1.45	6.71	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	10.62	-
46	92-69-3		170.2	12.07	1.57	<2.50	<2.70	3.36	3.28	3.35	1.40	5.38	20.23	1	1	-1.67	9.44	-	9.82	-
50	843-55-0		268.4	12.17	1.47	-	4.26	-	5.00	-	5.30	8.08	40.46	2	2	-2.14	-	-	9.91	-
53	92-88-6		186.2	12.67	1.42	<2.50	<2.70	2.75	2.80	-	0.68	5.52	40.46	2	2	-1.97	-	-	9.74	-
58	2078-54-8		178.3	11.11	1.36	2.80	2.77	3.79	3.57	3.79	1.59	5.60	20.23	1	1	-3.33	11.10	-	11.00	-
61	101-53-1		184.2	11.8	1.33	<2.50	2.74	3.47	3.54	0.93	1.48	5.85	20.23	1	1	-2.52	10.29	-	10.23	-

Table2-4 カテゴリー II -B に該当するイオン存在割合 10%未満かつ Dmax ≥ 11 Å のフェノール(既存化学物質 23 物質) [続き]

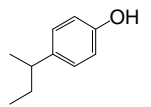
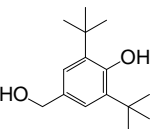
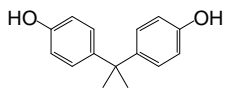
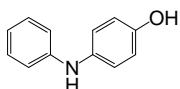
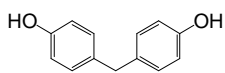
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
69	99-71-8		150.2	11.07	1.18	<2.50	<2.70	2.64	3.46	2.64	1.85	4.72	20.23	1	1	-2.60	10.37	-	10.11	-
76	88-26-6		236.4	11.58	1.04	-	2.76	-	3.56	-	6.90	7.05	40.46	2	2	-4.24	-	-	12.01	-
86	80-05-7		228.3	12.35	0.95	<2.50	2.85	3.44	3.64	3.43	4.06	6.86	40.46	2	2	-3.12	10.89	-	10.29	-
94	122-37-2		185.2	12.37	0.85	<2.50	<2.70	2.80	2.46	-	2.33	5.71	32.26	1	2	-2.69	-	-	1.76	10.46
103	620-92-8		200.2	12.34	0.71	<2.50	<2.70	2.91	3.06	2.90	5.04	5.99	40.46	2	2	-1.86	9.63	10.32	9.91	-

Table2-5 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合 10%未満かつ Dmax ≥ 11 Å の芳香環を1つのみ持つフェノール(既存化学物質 9 物質)

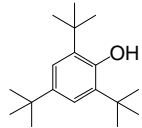
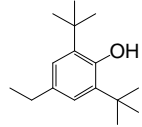
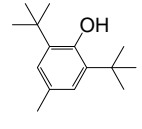
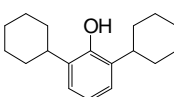
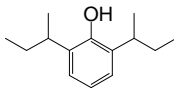
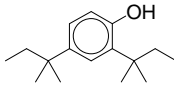
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
1	732-26-3		262.4	11.49	4.18	-	-	6.06	6.39	-	1.99	8.18	20.23	1	1	1.06	-	-	12.61	-
5	4130-42-1		234.4	11.56	3.41	4.73	4.81	5.60	5.52	-	1.95	7.33	20.23	1	1	-5.06	-	-	12.83	-
9	128-37-0		220.4	11.52	2.93	3.63	4.29	4.58	5.03	4.58	1.84	6.87	20.23	1	1	-6.23	14.00	-	12.76	-
12	4821-19-6		258.4	14.86	2.84	-	-	-	6.30	-	1.83	8.01	20.23	1	1	-2.82	-	-	10.59	-
16	5510-99-6		206.3	13.49	2.55	3.40	3.80	4.36	4.56	-	1.54	6.54	20.23	1	1	-2.80	-	-	10.57	-
17	120-95-6		234.4	12.39	2.52	-	-	-	6.31	-	1.16	7.37	20.23	1	1	-3.23	-	-	11.00	-

Table2-5 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax≥11Åの芳香環を1つのみ持つフェノール(既存化学物質9物質) [続き]

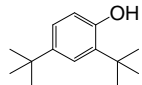
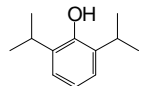
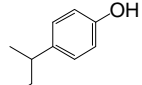
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
19	96-76-4		206.3	11.13	2.30	4.28	4.61	5.19	5.33	5.19	1.16	6.42	20.23	1	1	-3.88	11.65	-	11.56	-
58	2078-54-8		178.3	11.11	1.36	2.80	2.77	3.79	3.57	3.79	1.59	5.60	20.23	1	1	-3.33	11.10	-	11.00	-
69	99-71-8		150.2	11.07	1.18	<2.50	<2.70	2.64	3.46	2.64	1.85	4.72	20.23	1	1	-2.60	10.37	-	10.11	-

Table2-6 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax \geq 11Åの芳香環を2つ持つフェノール(既存化学物質9物質)

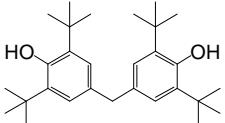
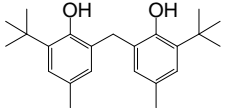
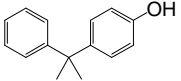
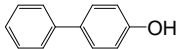
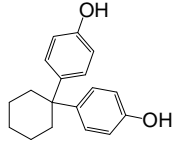
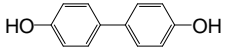
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
2	118-82-1		424.7	15.65	4.01	-	-	-	8.99	-	4.73	13.04	40.46	2	2	1.06	-	-	12.03	-
13	119-47-1		340.5	16.44	2.69	-	-	6.25	7.97	-	6.80	10.41	40.46	2	2	-3.56	-	-	11.33	-
28	599-64-4		212.3	11.40	2.06	-	3.34	-	4.12	-	1.45	6.71	20.23	1	1	-2.72	10.49	-	10.62	-
46	92-69-3		170.2	12.07	1.57	<2.50	<2.70	3.36	3.28	3.35	1.40	5.38	20.23	1	1	-1.67	9.44	-	9.82	-
50	843-55-0		268.4	12.17	1.47	-	4.26	-	5.00	-	5.30	8.08	40.46	2	2	-2.14	-	-	9.91	-
53	92-88-6		186.2	12.67	1.42	<2.50	<2.70	2.75	2.80	-	0.68	5.52	40.46	2	2	-1.97	-	-	9.74	-

Table2-6 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax≥11Åの芳香環を2つ持つフェノール(既存化学物質9物質) [続き]

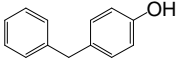
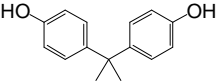
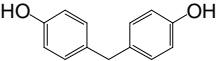
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
61	101-53-1		184.2	11.8	1.33	<2.50	2.74	3.47	3.54	0.93	1.48	5.85	20.23	1	1	-2.52	10.29	-	10.23	-
86	80-05-7		228.3	12.35	0.95	<2.50	2.85	3.44	3.64	3.43	4.06	6.86	40.46	2	2	-3.12	10.89	-	10.29	-
103	620-92-8		200.2	12.34	0.71	<2.50	<2.70	2.91	3.06	2.90	5.04	5.99	40.46	2	2	-1.86	9.63	10.32	9.91	-

Table2-7 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax \geq 11Åのその他の構造を持つフェノール(既存化学物質5物質)

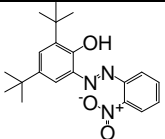
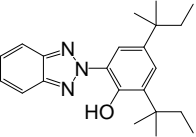
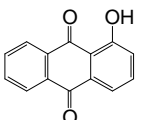
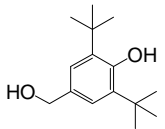
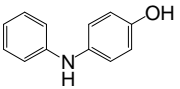
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
4	52184-14-2		355.4	15.12	3.63	-	-	-	8.55	-	38.44	10.10	90.77	3	1	1.06	-	-	9.59	-
8	25973-55-1		351.5	15.03	3.14	-	-	-	7.25	-	0.57	10.64	50.94	3	1	-1.08	-	-	0.74	8.85
26	129-43-1		224.2	11.67	2.09	2.79	2.85	3.79	3.64	3.78	4.52	6.25	54.37	3	1	-3.71	11.48	-	7.15	-
76	88-26-6		236.4	11.58	1.04	-	2.76	-	3.56	-	6.90	7.05	40.46	2	2	-4.24	-	-	12.01	-
94	122-37-2		185.2	12.37	0.85	<2.50	<2.70	2.80	2.46	-	2.33	5.71	32.26	1	2	-2.69	-	-	1.76	10.46

Table2-8 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%未満かつDmax≥11Åのヒドロキシル基のオルト位に2つの置換基を持つ単環フェノール
(既存化学物質6物質)

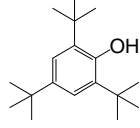
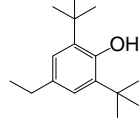
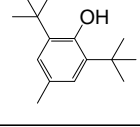
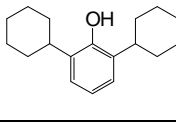
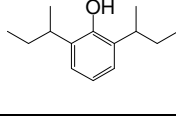
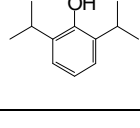
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
1	732-26-3		262.4	11.49	4.18	-	-	6.06	6.39	-	1.99	8.18	20.23	1	1	1.06	-	-	12.61	-
5	4130-42-1		234.4	11.56	3.41	4.73	4.81	5.60	5.52	-	1.95	7.33	20.23	1	1	-5.06	-	-	12.83	-
9	128-37-0		220.4	11.52	2.93	3.63	4.29	4.58	5.03	4.58	1.84	6.87	20.23	1	1	-6.23	14.00	-	12.76	-
12	4821-19-6		258.4	14.86	2.84	-	-	-	6.30	-	1.83	8.01	20.23	1	1	-2.82	-	-	10.59	-
16	5510-99-6		206.3	13.49	2.55	3.40	3.80	4.36	4.56	-	1.54	6.54	20.23	1	1	-2.80	-	-	10.57	-
58	2078-54-8		178.3	11.11	1.36	2.80	2.77	3.79	3.57	3.79	1.59	5.60	20.23	1	1	-3.33	11.10	-	11.00	-

Table2-9 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%以上かつDmax<11Åのフェノール(既存化学物質20物質)

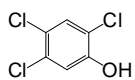
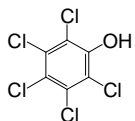
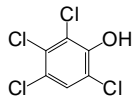
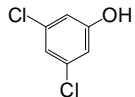
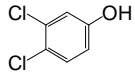
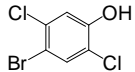
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
14	95-95-4		197.4	9.5	2.64	2.55	<2.70	3.56	3.45	2.48	1.71	4.25	20.23	1	1	1.06	6.71	-	7.10	-
30	87-86-5		266.3	9.51	2.03	4.21	3.99	5.12	4.74	2.12	1.54	5.06	20.23	1	1	3.02	4.75	-	4.68	-
36	58-90-2		231.9	9.5	1.78	3.49	3.31	4.45	4.09	1.92	3.13	4.67	20.23	1	1	2.55	5.22	-	5.64	-
37	591-35-5		163.0	8.64	1.75	2.52	<2.70	3.53	2.80	3.39	1.99	3.82	20.23	1	1	-0.41	8.18	-	8.04	-
43	95-77-2		163.0	9	1.62	<2.50	<2.70	3.21	2.80	3.15	4.25	3.82	20.23	1	1	-0.81	8.58	-	8.56	-
44	1940-42-7		241.9	9.49	1.59	<2.50	2.90	2.42	3.69	-	1.87	4.54	20.23	1	1	0.79	-	-	6.98	-

Table2-9 カテゴリーⅡ-B に該当するイオン存在割合 10%以上かつ Dmax<11 Å のフェノール(既存化学物質 20 物質) [続き]


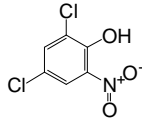

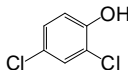
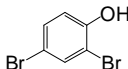
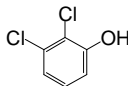
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
49	95-56-7		173.0	8.66	1.51	<2.50	<2.70	2.32	2.40	2.24	6.46	3.63	20.23	1	1	-0.67	8.44	-	8.43	-
51	609-89-2		208.0	9.29	1.43	<2.50	<2.70	1.90	3.20	-1.15	9.14	4.33	66.05	1	1	3.17	4.60	-	4.64	-
60	95-57-8		128.6	8.32	1.34	<2.50	<2.70	2.15	2.16	2.08	5.76	3.38	20.23	1	1	-0.76	8.53	-	8.50	-
66	120-83-2		163.0	8.97	1.22	<2.50	<2.70	3.06	2.80	2.82	0.17	3.82	20.23	1	1	-0.11	7.88	-	8.05	-
68	615-58-7		251.9	9.29	1.19	<2.50	<2.70	3.22	3.29	3.03	5.26	4.32	20.23	1	1	0.05	7.72	-	7.86	-
70	576-24-9		163.0	8.33	1.11	<2.50	<2.70	2.88	2.80	2.58	0.75	3.83	20.23	1	1	0.01	7.76	-	7.53	-

Table2-9 カテゴリーⅡ-B に該当するイオン存在割合 10%以上かつ Dmax<11 Å のフェノール(既存化学物質 20 物質) [続き]

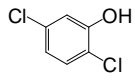
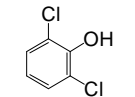
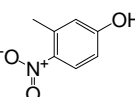
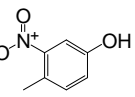
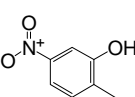
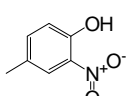
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
77	583-78-8		163.0	9.49	1.02	<2.50	<2.70	3.23	2.80	2.79	1.33	3.82	20.23	1	1	0.26	7.51	-	7.53	-
78	87-65-0		163.0	8.72	1.00	<2.50	<2.70	2.87	2.80	1.89	3.21	3.83	20.23	1	1	0.94	6.83	-	7.02	-
80	2581-34-2		153.1	9.31	0.99	<2.50	<2.70	2.48	2.46	1.92	26.82	3.88	66.05	1	1	0.43	7.34	-	7.39	-
83	2042-14-0		153.1	9.08	0.96	<2.50	<2.70	2.45	2.46	2.40	35.12	3.88	66.05	1	1	-0.85	8.62	-	8.66	-
91	5428-54-6		153.1	9.51	0.89	<2.50	<2.70	2.56	2.46	2.50	42.35	3.88	66.05	1	1	-0.82	8.59	-	8.68	-
99	119-33-5		153.1	9.2	0.80	<2.50	<2.70	2.37	2.46	2.00	20.89	3.88	66.05	1	1	0.15	7.62	-	7.45	-

Table2-9 カテゴリーⅡ-Bに該当するイオン存在割合10%以上かつDmax<11Åのフェノール(既存化学物質20物質)[続き]

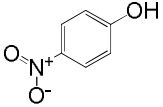
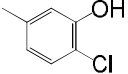
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
109	100-02-7		139.1	9.27	0.60	<2.50	<2.70	1.95	1.91	1.22	27.69	3.42	66.05	1	1	0.65	7.12	-	7.23	-
114	615-74-7		142.6	9.21	0.45	<2.50	<2.70	2.90	2.70	-	1.34	3.83	20.23	1	1	-0.83	-	-	8.60	-

Table2-10 カテゴリーⅡ－B に該当するイオン存在割合 10%以上かつ Dmax<11 Å のフェノール(既存化学物質 17 物質)

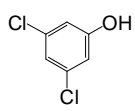
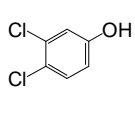
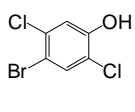
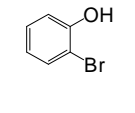
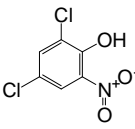
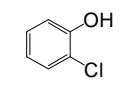
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
37	591-35-5		163.0	8.64	1.75	2.52	<2.70	3.53	2.80	3.39	1.99	3.82	20.23	1	1	1.06	8.18	-	8.04	-
43	95-77-2		163.0	9	1.62	<2.50	<2.70	3.21	2.80	3.15	4.25	3.82	20.23	1	1	-0.81	8.58	-	8.56	-
44	1940-42-7		241.9	9.49	1.59	<2.50	2.90	2.42	3.69	-	1.87	4.54	20.23	1	1	0.79	-	-	6.98	-
49	95-56-7		173.0	8.66	1.51	<2.50	<2.70	2.32	2.40	2.24	6.46	3.63	20.23	1	1	-0.67	8.44	-	8.43	-
51	609-89-2		208.0	9.29	1.43	<2.50	<2.70	1.90	3.20	-1.15	9.14	4.33	66.05	1	1	3.17	4.60	-	4.64	-
60	95-57-8		128.6	8.32	1.34	<2.50	<2.70	2.15	2.16	2.08	5.76	3.38	20.23	1	1	-0.76	8.53	-	8.50	-

Table2-10 カテゴリーII-Bに該当するイオン存在割合10%以上かつDmax<11Åのフェノール(データセットD、既存化学物質17物質) [続き]

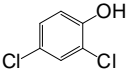
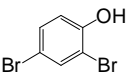
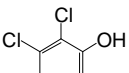
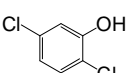
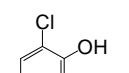
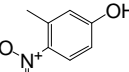
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
66	120-83-2		163.0	8.97	1.22	<2.50	<2.70	3.06	2.80	2.82	0.17	3.82	20.23	1	1	-0.11	7.88	-	8.05	-
68	615-58-7		251.9	9.29	1.19	<2.50	<2.70	3.22	3.29	3.03	5.26	4.32	20.23	1	1	0.05	7.72	-	7.86	-
70	576-24-9		163.0	8.33	1.11	<2.50	<2.70	2.88	2.80	2.58	0.75	3.83	20.23	1	1	0.01	7.76	-	7.53	-
77	583-78-8		163.0	9.49	1.02	<2.50	<2.70	3.23	2.80	2.79	1.33	3.82	20.23	1	1	0.26	7.51	-	7.53	-
78	87-65-0		163.0	8.72	1.00	<2.50	<2.70	2.87	2.80	1.89	3.21	3.83	20.23	1	1	0.94	6.83	-	7.02	-
80	2581-34-2		153.1	9.31	0.99	<2.50	<2.70	2.48	2.46	1.92	26.82	3.88	66.05	1	1	0.43	7.34	-	7.39	-

Table2-10 カテゴリーII-Bに該当するイオン存在割合10%以上かつDmax<11Åのフェノール(データセットD、既存化学物質17物質) [続き]

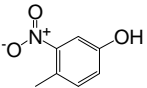
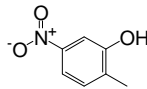
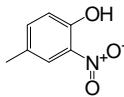
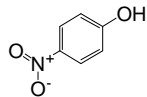
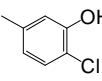
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
83	2042-14-0		153.1	9.08	0.96	<2.50	<2.70	2.45	2.46	2.40	35.12	3.88	66.05	1	1	-0.85	8.62	-	8.66	-
91	5428-54-6		153.1	9.51	0.89	<2.50	<2.70	2.56	2.46	2.50	42.35	3.88	66.05	1	1	-0.82	8.59	-	8.68	-
99	119-33-5		153.1	9.2	0.80	<2.50	<2.70	2.37	2.46	2.00	20.89	3.88	66.05	1	1	0.15	7.62	-	7.45	-
109	100-02-7		139.1	9.27	0.60	<2.50	<2.70	1.95	1.91	1.22	27.69	3.42	66.05	1	1	0.65	7.12	-	7.23	-
114	615-74-7		142.6	9.21	0.45	<2.50	<2.70	2.90	2.70	-	1.34	3.83	20.23	1	1	-0.83	-	-	8.60	-

Table2-11 カテゴリーⅡ -B に該当するイオン存在割合 10%以上かつ Dmax ≥ 11 Å のフェノール(既存化学物質 4 物質)

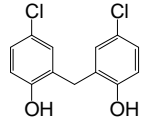
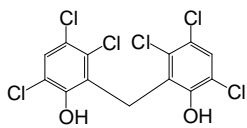
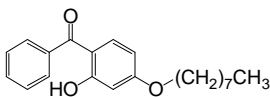
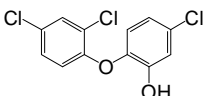
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
22	97-23-4		269.1	11.74	2.21	3.66	3.57	4.61	4.34	4.23	8.99	6.94	40.46	2	2	1.06	7.60	11.50	9.15	9.85
27	70-30-4		406.9	13.6	2.07	-	-	6.74	6.92	4.63	5.46	8.69	40.46	2	2	2.12	5.65	10.1	6.49	-
31	1843-05-6		326.4	22.46	2.00	-	-	-	6.96	-	7.33	9.85	46.53	3	1	0.18	-	-	7.59	-
40	3380-34-5		289.5	13.65	1.69	3.82	3.90	4.76	4.66	-	4.29	6.95	29.46	1	1	-0.03	-	-	7.80	-

Table2-12 カテゴリーⅡ-Bに該当する芳香族1級及び2級アミン(既存化学物質44物質)

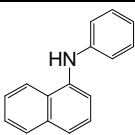
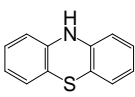
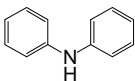
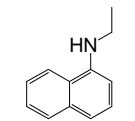
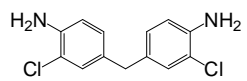
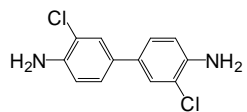
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
7	90-30-2		219.3	13.65	3.15	-	3.70	-	4.47	-	0.63	7.14	12.03	0	1	1.06	-	-	0.78	-
15	92-84-2		199.3	11.73	2.60	2.86	3.03	3.85	3.82	3.85	3.30	6.05	12.03	0	1	5.25	2.52	-	-1.87	-
18	122-39-4		169.2	11.64	2.32	2.55	<2.70	3.56	3.29	3.56	0.61	5.54	12.03	0	1	6.94	0.83	-	0.78	-
20	118-44-5		171.2	11.71	2.26	<2.50	<2.70	3.45	3.29	3.45	2.78	5.59	12.03	0	1	3.58	4.19	-	5.12	-
21	101-14-4		267.2	12.97	2.23	2.92	<2.70	3.91	3.47	-	1.80	7.20	52.04	0	2	4.44	-	-	3.33	-
23	91-94-1		253.1	13.12	2.19	2.65	<2.70	3.65	3.21	-	1.23	6.73	52.04	0	2	5.07	-	-	2.70	-

Table2-12 カテゴリーⅡ-B に該当する芳香族 1 級及び 2 級アミン(既存化学物質 44 物質) [続き]

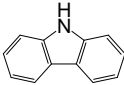
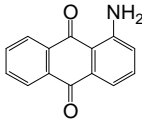
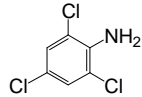
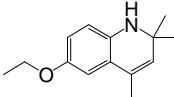
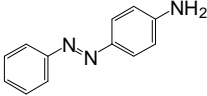
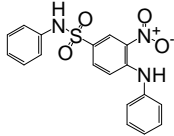
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
29	86-74-8		167.2	11.16	2.05	2.97	<2.70	3.96	3.23	-	1.44	5.40	15.79	0	1	10.17	-	-	-2.40	17.00
32	82-45-1		223.2	11.70	1.98	<2.50	2.73	3.31	3.53	3.30	3.29	6.42	60.16	2	1	6.53	1.24	-	-0.51	-
33	634-93-5		196.5	9.16	1.91	2.69	<2.70	3.69	3.01	3.69	3.44	4.39	26.02	0	1	7.80	-0.03	-	0.07	-
41	91-53-2		217.3	13.62	1.64	-	3.08	-	3.87	-	1.65	6.62	21.26	1	1	2.93	4.84	-	5.02	-
45	60-09-3		197.2	11.68	1.58	<2.50	<2.70	3.41	3.19	3.41	22.06	6.05	50.74	2	1	4.84	2.93	-	3.12	-
47	5124-25-4		369.4	14.03	1.57	3.41	3.56	4.37	4.33	-	31.17	9.87	104.02	2	2	11.84	-	-	-4.07	7.76

Table2-12 カテゴリーⅡ-Bに該当する芳香族1級及び2級アミン(既存化学物質44物質)[続き]

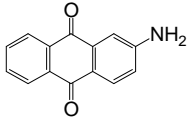
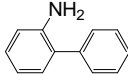
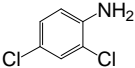
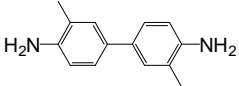

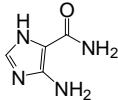
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
48	117-79-3		223.2	12.72	1.52	<2.50	<2.70	3.31	2.43	3.31	7.70	6.42	60.16	2	1	5.97	1.80	-	0.97	-
56	90-41-5		169.2	11.43	1.37	<2.50	<2.70	2.78	2.84	2.78	2.13	5.51	26.02	0	1	3.95	3.82	-	3.81	-
57	554-00-7		162.0	9.17	1.36	<2.50	<2.70	2.88	2.37	2.88	6.22	3.96	26.02	0	1	5.74	2.04	-	2.02	-
59	119-93-7		212.3	13.07	1.35	<2.50	<2.70	2.37	3.02	2.36	0.96	6.66	52.04	0	2	4.47	3.30	4.50	4.59	-
64	134-32-7		143.2	9.4	1.26	<2.50	<2.70	2.25	2.25	2.25	2.47	4.64	26.02	0	1	3.84	3.93	-	4.21	-
71	72-40-2		126.1	8.76	1.10	-	-2.21	-	-1.47	-	0.91	3.06	97.79	3	4	3.75	4.02	-	4.74	14.79

Table2-12 カテゴリーⅡ-B に該当する芳香族 1 級及び 2 級アミン(既存化学物質 44 物質) [続き]

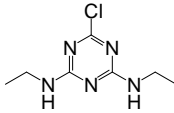
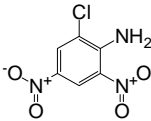
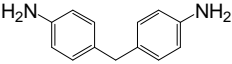
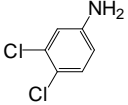
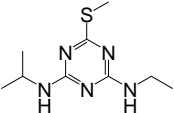
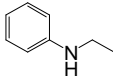
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [A]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [A ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
75	122-34-9		201.7	13.66	1.08	<2.50	<2.70	2.18	2.40	2.18	15.29	5.13	62.73	3	2	5.97	1.80	-	2.71	-
82	3531-19-9		217.6	9.77	0.97	-	<2.70	-	2.48	-	39.11	4.50	117.66	0	1	14.45	-6.68	-	-6.83	-
84	101-77-9		198.3	13.14	0.96	<2.50	<2.70	1.62	2.18	1.61	8.66	6.24	52.04	0	2	2.59	5.19	-	5.32	-
88	95-76-1		162.0	9.14	0.93	<2.50	<2.70	2.69	2.37	2.69	10.59	3.96	26.02	0	1	4.80	2.97	-	2.90	-
90	834-12-8		227.3	13.66	0.91	<2.50	<2.70	2.98	3.32	2.98	3.77	6.26	62.73	3	2	3.77	4.00	-	3.71	-
92	103-69-5		121.2	9.31	0.88	<2.50	<2.70	2.16	2.11	2.16	2.31	3.98	12.03	0	1	2.77	5.00	-	5.12	-

Table2-12 カテゴリーⅡ-B に該当する芳香族 1 級及び 2 級アミン(既存化学物質 44 物質) [続き]

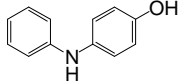
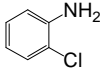
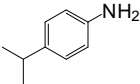
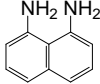
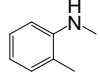
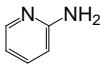
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [A]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [A ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
94	122-37-2		185.2	12.37	0.85	<2.50	<2.70	2.80	2.46	-	2.33	5.71	32.26	1	2	6.01	-	-	1.76	10.46
96	95-51-2		127.6	8.32	0.82	<2.50	<2.70	1.90	1.72	1.90	3.13	3.51	26.02	0	1	5.19	2.58	-	2.65	-
100	99-88-7		135.2	10.30	0.80	<2.50	<2.70	2.40	2.53	2.40	2.04	4.37	26.02	0	1	2.92	4.85	-	5.01	-
102	479-27-6		158.2	9.4	0.74	<2.50	<2.70	2.21	1.34	2.21	6.78	4.90	52.04	0	2	3.79	3.98	-	4.46	-
104	611-21-2		121.2	9.37	0.68	<2.50	<2.70	2.06	2.17	2.05	1.98	3.97	12.03	0	1	3.16	4.61	-	4.73	-
106	504-29-0		94.1	7.94	0.65	<2.50	<2.70	0.55	0.53	0.55	3.20	2.85	38.91	1	1	0.98	-7.60	6.79	6.67	-

Table2-12 カテゴリーⅡ-B に該当する芳香族 1 級及び 2 級アミン(既存化学物質 44 物質) [続き]

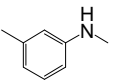
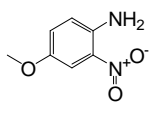
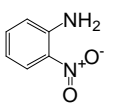
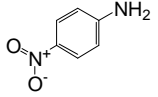
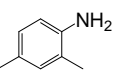
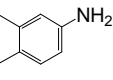
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
107	696-44-6		121.2	10.04	0.65	<2.50	<2.70	2.19	2.17	2.19	1.79	3.96	12.03	0	1	2.92	4.85	-	5.00	-
110	96-96-8		168.2	10.32	0.54	<2.50	<2.70	1.94	2.10	1.94	18.57	4.20	81.07	1	1	6.98	0.80	-	0.96	-
111	88-74-4		138.1	8.55	0.52	<2.50	<2.70	1.85	2.02	1.85	27.82	3.57	71.84	0	1	8.07	-0.30	-	-0.23	-
112	100-01-6		138.1	9.43	0.50	<2.50	<2.70	1.42	1.47	1.42	53.59	3.56	71.84	0	1	6.79	0.98	-	1.01	-
113	95-68-1		121.2	8.99	0.50	<2.50	<2.70	1.68	2.17	1.68	2.67	3.91	26.02	0	1	2.92	4.85	-	4.89	-
115	95-64-7		121.2	9.01	0.42	-	<2.70	-	2.17	-	2.11	3.91	26.02	0	1	2.60	5.17	-	5.15	-

Table2-12 カテゴリーⅡ-B に該当する芳香族 1 級及び 2 級アミン(既存化学物質 44 物質) [続き]

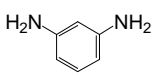
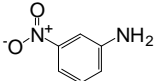
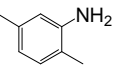
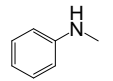
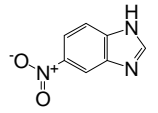
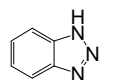
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [A]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [A ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
117	108-45-2		108.1	8.63	0.38	<2.50	<2.70	-0.36	-0.39	-0.36	0.95	3.28	52.04	0	2	5.36	2.41	5.035	4.88	-
120	99-09-2		138.1	9.2	0.34	<2.50	<2.70	1.46	1.47	1.45	35.45	3.56	71.84	0	1	5.36	2.41	-	2.46	-
122	95-78-3		121.2	9.04	0.30	<2.50	<2.70	1.87	2.17	1.87	1.76	3.91	26.02	0	1	3.23	4.54	-	4.58	-
124	100-61-8		107.2	9.38	0.29	<2.50	<2.70	1.66	1.62	1.66	1.69	3.52	12.03	0	1	2.88	4.90	-	4.70	-
129	94-52-0		163.1	10.36	0.11	<2.50	<2.70	1.64	1.05	1.61	63.26	4.15	74.50	2	2	4.35	3.42	10.86	10.95	-
130	95-14-7		119.1	8.19	0.10	<2.50	<2.70	1.44	1.17	1.44	13.34	3.43	41.57	3	2	6.17	1.60	8.44	8.38	-

Table2-12 カテゴリーⅡ-Bに該当する芳香族1級及び2級アミン(既存化学物質44物質)[続き]

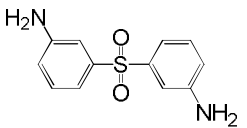
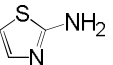
No.	CAS No.	分子構造	分子量	D _{max} [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
132	599-61-1		248.3	11.29	0.01	-	<2.70	-	0.77	-	16.93	6.77	86.18	2	2	4.61	-	-	3.16	-
136	96-50-4		100.1	7.67	-0.08	<2.50	<2.70	0.38	0.83	0.38	3.40	2.68	38.91	1	1	2.33	5.44	-	4.94	-

Table2-13 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax<11 Å の芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 24 物質)

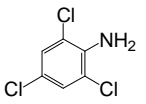
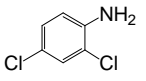
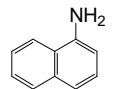
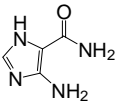
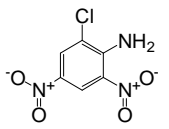
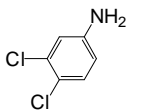
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
33	634-93-5		196.5	9.16	1.91	2.69	<2.70	3.69	3.01	3.69	3.44	4.39	26.02	0	1	1.06	-0.03	-	0.07	-
57	554-00-7		162.0	9.17	1.36	<2.50	<2.70	2.88	2.37	2.88	6.22	3.96	26.02	0	1	5.74	2.04	-	2.02	-
64	134-32-7		143.2	9.4	1.26	<2.50	<2.70	2.25	2.25	2.25	2.47	4.64	26.02	0	1	3.84	3.93	-	4.21	-
71	72-40-2		126.1	8.76	1.10	-	-2.21	-	-1.47	-	0.91	3.06	97.79	3	4	3.75	4.02	-	4.74	14.79
82	3531-19-9		217.6	9.77	0.97	-	<2.70	-	2.48	-	39.11	4.50	117.66	0	1	14.45	-6.68	-	-6.83	-
88	95-76-1		162.0	9.14	0.93	<2.50	<2.70	2.69	2.37	2.69	10.59	3.96	26.02	0	1	4.80	2.97	-	2.90	-

Table2-13 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax<11 Å の芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 24 物質) [続き]

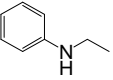
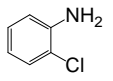
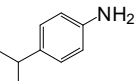
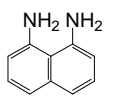
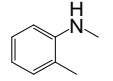
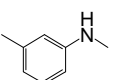
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
92	103-69-5		121.2	9.31	0.88	<2.50	<2.70	2.16	2.11	2.16	2.31	3.98	12.03	0	1	2.77	5.00	-	5.12	-
96	95-51-2		127.6	8.32	0.82	<2.50	<2.70	1.90	1.72	1.90	3.13	3.51	26.02	0	1	5.19	2.58	-	2.65	-
100	99-88-7		135.2	10.30	0.80	<2.50	<2.70	2.40	2.53	2.40	2.04	4.37	26.02	0	1	2.92	4.85	-	5.01	-
102	479-27-6		158.2	9.4	0.74	<2.50	<2.70	2.21	1.34	2.21	6.78	4.90	52.04	0	2	3.79	3.98	-	4.46	-
104	611-21-2		121.2	9.37	0.68	<2.50	<2.70	2.06	2.17	2.05	1.98	3.97	12.03	0	1	3.16	4.61	-	4.73	-
107	696-44-6		121.2	10.04	0.65	<2.50	<2.70	2.19	2.17	2.19	1.79	3.96	12.03	0	1	2.92	4.85	-	5.00	-

Table2-13 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax<11 Å の芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 24 物質) [続き]

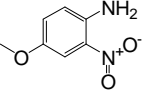
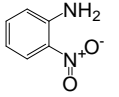
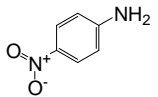
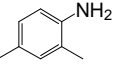
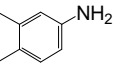
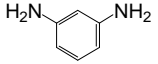
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
110	96-96-8		168.2	10.32	0.54	<2.50	<2.70	1.94	2.10	1.94	18.57	4.20	81.07	1	1	6.98	0.80	-	0.96	-
111	88-74-4		138.1	8.55	0.52	<2.50	<2.70	1.85	2.02	1.85	27.82	3.57	71.84	0	1	8.07	-0.30	-	-0.23	-
112	100-01-6		138.1	9.43	0.50	<2.50	<2.70	1.42	1.47	1.42	53.59	3.56	71.84	0	1	6.79	0.98	-	1.01	-
113	95-68-1		121.2	8.99	0.50	<2.50	<2.70	1.68	2.17	1.68	2.67	3.91	26.02	0	1	2.92	4.85	-	4.89	-
115	95-64-7		121.2	9.01	0.42	-	<2.70	-	2.17	-	2.11	3.91	26.02	0	1	2.60	5.17	-	5.15	-
117	108-45-2		108.1	8.63	0.38	<2.50	<2.70	-0.36	-0.39	-0.36	0.95	3.28	52.04	0	2	5.36	2.41	5.035	4.88	-

Table2-13 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax<11 Å の芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 24 物質) [続き]

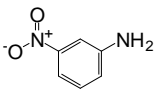
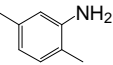
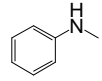
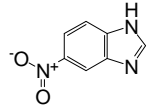
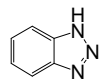
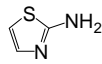
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
120	99-09-2		138.1	9.2	0.34	<2.50	<2.70	1.46	1.47	1.45	35.45	3.56	71.84	0	1	5.36	2.41	-	2.46	-
122	95-78-3		121.2	9.04	0.30	<2.50	<2.70	1.87	2.17	1.87	1.76	3.91	26.02	0	1	3.23	4.54	-	4.58	-
124	100-61-8		107.2	9.38	0.29	<2.50	<2.70	1.66	1.62	1.66	1.69	3.52	12.03	0	1	2.88	4.90	-	4.70	-
129	94-52-0		163.1	10.36	0.11	<2.50	<2.70	1.64	1.05	1.61	63.26	4.15	74.50	2	2	4.35	3.42	10.86	10.95	-
130	95-14-7		119.1	8.19	0.10	<2.50	<2.70	1.44	1.17	1.44	13.34	3.43	41.57	3	2	6.17	1.60	8.44	8.38	-
136	96-50-4		100.1	7.67	-0.08	<2.50	<2.70	0.38	0.83	0.38	3.40	2.68	38.91	1	1	2.33	5.44	-	4.94	-

Table2-14 pH-pKa ≥ 1 かつ Dmax<11Å の単環アルキルアニリン(既存化学物質 17 物質)

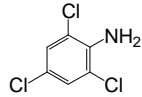
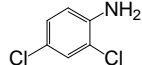
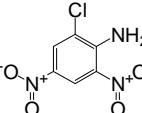
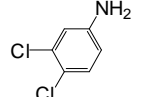
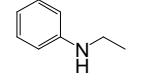
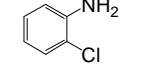
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
33	634-93-5		196.5	9.16	1.91	2.69	<2.70	3.69	3.01	3.69	3.44	4.39	26.02	0	1	1.06	-0.03	-	0.07	-
57	554-00-7		162.0	9.17	1.36	<2.50	<2.70	2.88	2.37	2.88	6.22	3.96	26.02	0	1	5.74	2.04	-	2.02	-
82	3531-19-9		217.6	9.77	0.97	-	<2.70	-	2.48	-	39.11	4.50	117.66	0	1	14.45	-6.68	-	-6.83	-
88	95-76-1		162.0	9.14	0.93	<2.50	<2.70	2.69	2.37	2.69	10.59	3.96	26.02	0	1	4.80	2.97	-	2.90	-
92	103-69-5		121.2	9.31	0.88	<2.50	<2.70	2.16	2.11	2.16	2.31	3.98	12.03	0	1	2.77	5.00	-	5.12	-
96	95-51-2		127.6	8.32	0.82	<2.50	<2.70	1.90	1.72	1.90	3.13	3.51	26.02	0	1	5.19	2.58	-	2.65	-

Table2-14 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax<11 Å の単環アルキルアニリン(既存化学物質 17 物質) [続き]

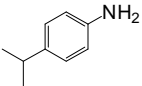

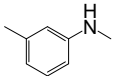
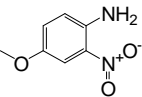
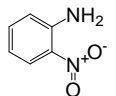
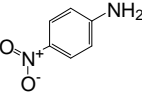
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
100	99-88-7		135.2	10.30	0.80	<2.50	<2.70	2.40	2.53	2.40	2.04	4.37	26.02	0	1	2.92	4.85	-	5.01	-
104	611-21-2		121.2	9.37	0.68	<2.50	<2.70	2.06	2.17	2.05	1.98	3.97	12.03	0	1	3.16	4.61	-	4.73	-
107	696-44-6		121.2	10.04	0.65	<2.50	<2.70	2.19	2.17	2.19	1.79	3.96	12.03	0	1	2.92	4.85	-	5.00	-
110	96-96-8		168.2	10.32	0.54	<2.50	<2.70	1.94	2.10	1.94	18.57	4.20	81.07	1	1	6.98	0.80	-	0.96	-
111	88-74-4		138.1	8.55	0.52	<2.50	<2.70	1.85	2.02	1.85	27.82	3.57	71.84	0	1	8.07	-0.30	-	-0.23	-
112	100-01-6		138.1	9.43	0.50	<2.50	<2.70	1.42	1.47	1.42	53.59	3.56	71.84	0	1	6.79	0.98	-	1.01	-

Table2-14 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax<11 Å の単環アルキルアニリン(既存化学物質 17 物質) [続き]

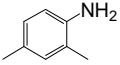
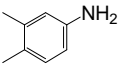
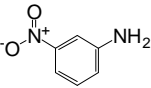
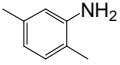

No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
113	95-68-1		121.2	8.99	0.50	<2.50	<2.70	1.68	2.17	1.68	2.67	3.91	26.02	0	1	2.92	4.85	-	4.89	-
115	95-64-7		121.2	9.01	0.42	-	<2.70	-	2.17	-	2.11	3.91	26.02	0	1	2.60	5.17	-	5.15	-
120	99-09-2		138.1	9.2	0.34	<2.50	<2.70	1.46	1.47	1.45	35.45	3.56	71.84	0	1	5.36	2.41	-	2.46	-
122	95-78-3		121.2	9.04	0.30	<2.50	<2.70	1.87	2.17	1.87	1.76	3.91	26.02	0	1	3.23	4.54	-	4.58	-
124	100-61-8		107.2	9.38	0.29	<2.50	<2.70	1.66	1.62	1.66	1.69	3.52	12.03	0	1	2.88	4.90	-	4.70	-

Table2-15 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax \geq 11 Å の芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 19 物質)

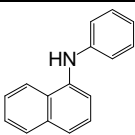
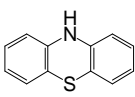
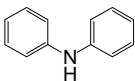
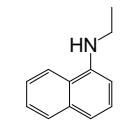
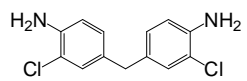
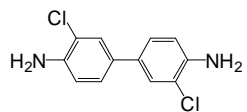
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
7	90-30-2		219.3	13.65	3.15	-	3.70	-	4.47	-	0.63	7.14	12.03	0	1	1.06	-	-	0.78	-
15	92-84-2		199.3	11.73	2.60	2.86	3.03	3.85	3.82	3.85	3.30	6.05	12.03	0	1	5.25	2.52	-	-1.87	-
18	122-39-4		169.2	11.64	2.32	2.55	<2.70	3.56	3.29	3.56	0.61	5.54	12.03	0	1	6.94	0.83	-	0.78	-
20	118-44-5		171.2	11.71	2.26	<2.50	<2.70	3.45	3.29	3.45	2.78	5.59	12.03	0	1	3.58	4.19	-	5.12	-
21	101-14-4		267.2	12.97	2.23	2.92	<2.70	3.91	3.47	-	1.80	7.20	52.04	0	2	4.44	-	-	3.33	-
23	91-94-1		253.1	13.12	2.19	2.65	<2.70	3.65	3.21	-	1.23	6.73	52.04	0	2	5.07	-	-	2.70	-

Table2-15 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax \geq 11 Åの芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 19 物質) [続き]

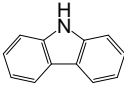
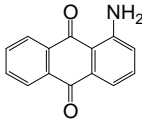
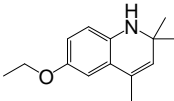
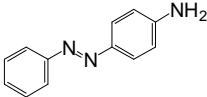
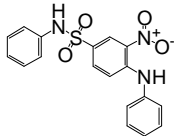
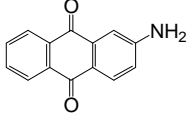
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
29	86-74-8		167.2	11.16	2.05	2.97	<2.70	3.96	3.23	-	1.44	5.40	15.79	0	1	10.17	-	-	-2.40	17.00
32	82-45-1		223.2	11.70	1.98	<2.50	2.73	3.31	3.53	3.30	3.29	6.42	60.16	2	1	6.53	1.24	-	-0.51	-
41	91-53-2		217.3	13.62	1.64	-	3.08	-	3.87	-	1.65	6.62	21.26	1	1	2.93	4.84	-	5.02	-
45	60-09-3		197.2	11.68	1.58	<2.50	<2.70	3.41	3.19	3.41	22.06	6.05	50.74	2	1	4.84	2.93	-	3.12	-
47	5124-25-4		369.4	14.03	1.57	3.41	3.56	4.37	4.33	-	31.17	9.87	104.02	2	2	11.84	-	-	-4.07	7.76
48	117-79-3		223.2	12.72	1.52	<2.50	<2.70	3.31	2.43	3.31	7.70	6.42	60.16	2	1	5.97	1.80	-	0.97	-

Table2-15 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax \geq 11 Åの芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 19 物質) [続き]

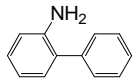
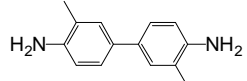
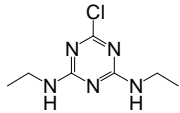
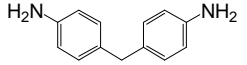
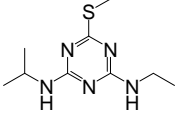
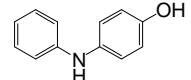
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
56	90-41-5		169.2	11.43	1.37	<2.50	<2.70	2.78	2.84	2.78	2.13	5.51	26.02	0	1	3.95	3.82	-	3.81	-
59	119-93-7		212.3	13.07	1.35	<2.50	<2.70	2.37	3.02	2.36	0.96	6.66	52.04	0	2	4.47	3.30	4.50	4.59	-
75	122-34-9		201.7	13.66	1.08	<2.50	<2.70	2.18	2.40	2.18	15.29	5.13	62.73	3	2	5.97	1.80	-	2.71	-
84	101-77-9		198.3	13.14	0.96	<2.50	<2.70	1.62	2.18	1.61	8.66	6.24	52.04	0	2	2.59	5.19	-	5.32	-
90	834-12-8		227.3	13.66	0.91	<2.50	<2.70	2.98	3.32	2.98	3.77	6.26	62.73	3	2	3.77	4.00	-	3.71	-
94	122-37-2		185.2	12.37	0.85	<2.50	<2.70	2.80	2.46	-	2.33	5.71	32.26	1	2	6.01	-	-	1.76	10.46

Table2-15 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax \geq 11 Å の芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 19 物質) [続き]

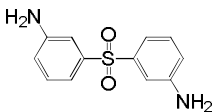
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
132	599-61-1		248.3	11.29	0.01	-	<2.70	-	0.77	-	16.93	6.77	86.18	2	2	4.61	-	-	3.16	-

Table2-16 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax \geq 11 Å のジフェニルメタン骨格またはビフェニル骨格を持つ芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 5 物質)

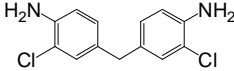
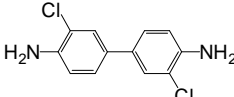
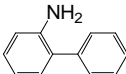
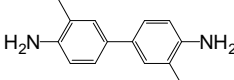
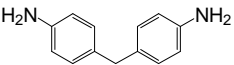
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
21	101-14-4		267.2	12.97	2.23	2.92	<2.70	3.91	3.47	-	1.80	7.20	52.04	0	2	1.06	-	-	3.33	-
23	91-94-1		253.1	13.12	2.19	2.65	<2.70	3.65	3.21	-	1.23	6.73	52.04	0	2	5.07	-	-	2.70	-
56	90-41-5		169.2	11.43	1.37	<2.50	<2.70	2.78	2.84	2.78	2.13	5.51	26.02	0	1	3.95	3.82	-	3.81	-
59	119-93-7		212.3	13.07	1.35	<2.50	<2.70	2.37	3.02	2.36	0.96	6.66	52.04	0	2	4.47	3.30	4.50	4.59	-
84	101-77-9		198.3	13.14	0.96	<2.50	<2.70	1.62	2.18	1.61	8.66	6.24	52.04	0	2	2.59	5.19	-	5.32	-

Table2-17 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax \geq 11 Å のトリアジン骨格を持つ芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 2 物質)

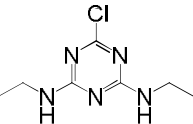
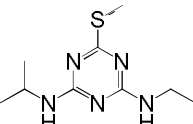
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
75	122-34-9		201.7	13.66	1.08	<2.50	<2.70	2.18	2.40	2.18	15.29	5.13	62.73	3	2	1.06	1.80	-	2.71	-
90	834-12-8		227.3	13.66	0.91	<2.50	<2.70	2.98	3.32	2.98	3.77	6.26	62.73	3	2	3.77	4.00	-	3.71	-

Table2-18 pH-pKa \geq 1 かつ Dmax \geq 11 Å のアントラキノン骨格を持つ芳香族 1 級または 2 級アミン(既存化学物質 2 物質)

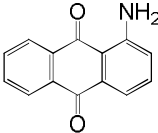
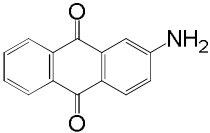
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
32	82-45-1		223.2	11.70	1.98	<2.50	2.73	3.31	3.53	3.30	3.29	6.42	60.16	2	1	1.06	1.24	-	-0.51	-
48	117-79-3		223.2	12.72	1.52	<2.50	<2.70	3.31	2.43	3.31	7.70	6.42	60.16	2	1	5.97	1.80	-	0.97	-

Table2-19 カテゴリーⅡ-Bに該当する Dmax<11 Åの脂肪族アルコール(既存化学物質 8 物質)

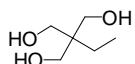
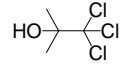
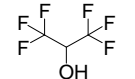
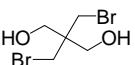
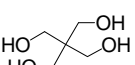
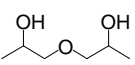
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
72	77-99-6		134.2	8.65	1.09	-	<2.70	-	0.19	-	8.59	3.46	60.69	3	3	1.06	-	-	14.01	-
123	57-15-8		177.5	7.64	0.30	<2.50	<2.70	1.88	2.09	-	3.68	3.55	20.23	1	1	-5.10	-	-	12.87	-
125	920-66-1		168.0	7.45	0.26	<2.50	<2.70	1.66	1.11	1.65	7.87	1.76	20.23	1	1	-1.62	9.39	-	9.75	-
135	3296-90-0		261.9	8.70	-0.04	<2.50	<2.70	2.29	0.85	-	1.14	4.32	40.46	2	2	-5.80	-	-	13.57	-
137	115-77-5		136.1	7.61	-0.10	<2.50	<2.70	-1.96	-1.77	-	3.82	3.14	80.92	4	4	-5.78	-	-	13.55	-
138	110-98-5		134.2	10.5	-0.12	-	<2.70	-	-0.64	-	0.02	3.46	49.69	3	2	-6.42	-	-	14.19	-

Table2-19 カテゴリー II -B に該当する Dmax<11 Å の脂肪族アルコール(既存化学物質 8 物質) [続き]

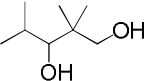

No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
140	144-19-4		146.2	8.93	-0.17	<2.50	<2.70	1.24	1.49	-	9.48	4.16	40.46	2	2	-7.04	-	-	14.81	-
143	126-30-7		104.1	7.04	-0.42	<2.50	<2.70	0.12	0.16	-	9.37	2.82	40.46	2	2	-6.80	-	-	14.57	-

Table2-20 カテゴリーⅡ-Bに該当する Dmax ≥ 11 Å の脂肪族アルコール(既存化学物質 4 物質)


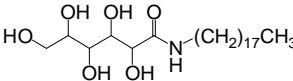
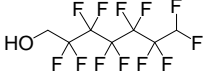
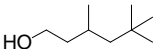
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
6	307-70-0		532.1	15.23	3.33	-	-	-	8.36	-	9.84	5.30	2023	1	1	1.06	-	-	12.89	-
10	18375-66-1		447.6	34.41	2.86	-	4.67	-	5.39	-	7.27	12.56	130.25	6	6	8.66	-	-	-0.89	12.47
67	335-99-9		332.1	12.59	1.21	<2.50	3.74	3.46	4.50	-	6.38	3.60	2023	1	1	-5.12	-	-	12.89	-
105	3452-97-9		144.3	11.03	0.67	<2.50	<2.70	3.42	3.11	-	3.05	4.47	2023	1	1	-7.36	-	-	15.13	-

Table2-21 カテゴリーⅡ-Bに該当するDmax<11Åの芳香族アルコール(既存化学物質3物質)

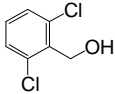
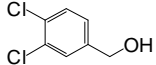
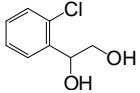
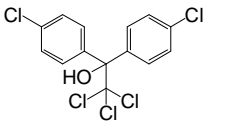
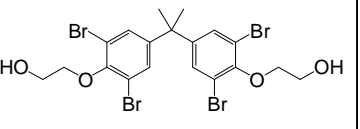
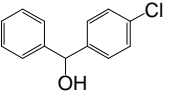
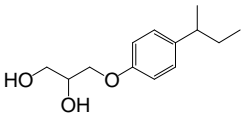
No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
119	15258-73-8		177.0	8.71	0.36	<2.50	<2.70	1.98	2.36	-	6.03	4.32	20.23	1	1	1.06	-	-	13.57	-
121	1805-32-9		177.0	9.69	0.30	<2.50	<2.70	2.74	2.36	-	0.81	4.32	20.23	1	1	-5.93	-	-	13.70	-
131	59365-60-5		172.6	9.98	0.07	<2.50	<2.70	1.17	1.08	-	9.61	4.48	40.46	2	2	-5.47	-	-	13.24	-

Table2-22 カテゴリーII-Bに該当するDmax≥11Åの芳香族アルコール(既存化学物質4物質)

No.	CAS No.	分子構造	分子量	Dmax [Å]	logBCF (実測値) [-]	logBCFmax (予測式(1)) [-]	logBCFmax (予測式(2)) [-]	logPow (実測値) [-]	logPow (計算値) [-]	logD [-]	μ^2 [D ²]	MR [-]	TPSA [Å ²]	Hy_acc	Hy_don	pH-pKa [pH=7.77]	pKa1 (実測値) [-]	pKa2 (実測値) [-]	pKa1 (計算値) [-]	pKa2 (計算値) [-]
3	115-32-2		370.5	13.12	3.78	4.19	5.12	5.10	5.81	-	1.23	8.56	2023	1	1	1.06	-	-	10.70	-
24	4162-45-2		632.0	15.9	2.16	4.05	-	4.97	6.78	-	20.29	12.03	58.92	4	2	-5.99	-	-	13.76	-
38	119-56-2		218.7	12.15	1.74	2.61	<2.70	3.61	3.35	-	0.66	6.34	2023	1	1	-5.57	-	-	13.34	-
101	-		224.3	15.29	0.75	-	<2.70	-	2.81	-	13.69	6.45	49.69	3	2	-5.76	-	-	13.53	-

3. カテゴリーⅡ－B に該当する未点検既存化学物質のリスト

Table3 カテゴリーⅡ－B に該当する物質(未点検既存化学物質)


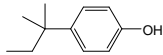
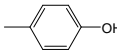
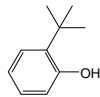

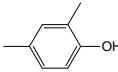

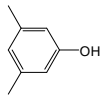
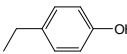
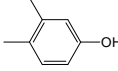
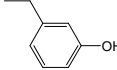
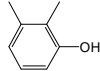
No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]	No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]
145	108-95-2		94.1	1.46	1.51	7.8	151	80-46-6		164.2	-	3.91	10.8
146	106-44-5		108.1	1.94	2.06	8.8	152	88-18-6		150.2	3.31	3.42	9.4
147	95-48-7		108.1	1.95	2.06	8.0	153	105-67-9		122.2	2.3	2.61	8.8
148	108-39-4		108.1	1.96	2.06	8.6	154	108-68-9		122.2	2.35	2.61	8.9
149	123-07-9		122.2	2.58	2.55	10.0	155	95-65-8		122.2	2.23	2.61	8.8
150	25429-37-2		122.2	2.4	2.55	9.4	156	526-75-0		122.2	2.48	2.61	8.6

Table3 カテゴリーⅡ-Bに該当する物質(未点検既存化学物質) [続き]

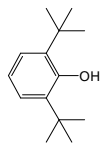
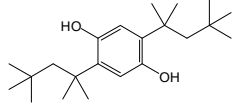
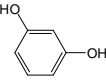
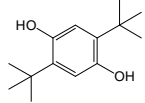
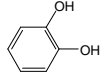
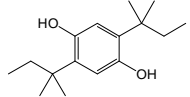

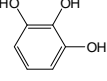
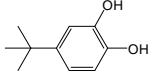
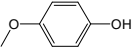
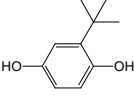
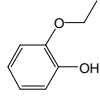
No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]	No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]
157	128-39-2		206.3	4.92	4.48	11.5	163	903-19-5		334.5	-	8.56	15.4
158	108-46-3		110.1	0.8	1.03	7.8	164	88-58-4		222.3	-	4.85	11.8
159	120-80-9		110.1	0.88	1.03	7.8	165	79-74-3		250.4	-	5.83	12.8
160	123-31-9		110.1	0.59	1.03	8.4	166	87-66-1		126.1	-	0.97	8.4
161	98-29-3		166.2	-	2.94	10.2	167	150-76-5		124.1	1.58	1.59	9.8
162	1948-33-0		166.2	-	2.94	9.4	168	94-71-3		138.2	1.68	1.83	9.2

Table3 カテゴリーⅡ-Bに該当する物質(未点検既存化学物質) [続き]

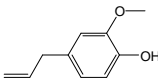
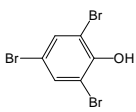
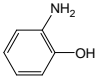
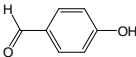
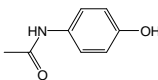
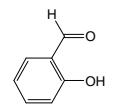
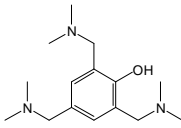
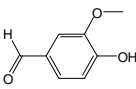
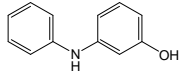
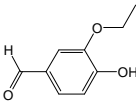
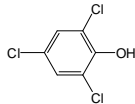
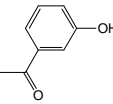
No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]	No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]
169	97-53-0		164.2	2.27	2.73	11.1	175	118-79-6		330.8	4.13	4.18	9.4
170	95-55-6		109.1	0.62	0.6	8.0	176	123-08-0		122.1	1.35	1.23	9.1
171	103-90-2		151.2	0.46	0.27	11.4	177	90-02-8		122.1	1.81	2.01	8.6
172	90-72-2		265.4	-	0.77	12.8	178	121-33-5		152.1	1.21	1.05	9.5
173	101-18-8		185.2	-	2.46	11.8	179	121-32-4		166.2	1.58	1.55	9.9
174	88-06-2		197.4	3.69	3.45	9.0	180	121-71-1		136.1	1.39	1.19	9.5

Table3 カテゴリーⅡ-Bに該当する物質(未点検既存化学物質) [続き]

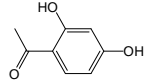
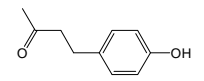
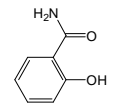
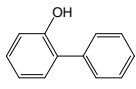
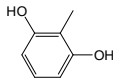
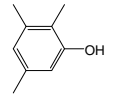
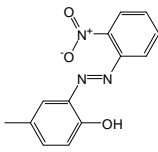
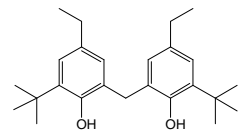
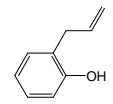
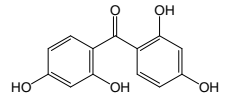
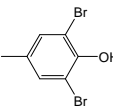
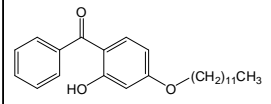
No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]	No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]
181	89-84-9		152.1	-	1.49	10.0	187	5471-51-2		164.2	-	1.48	12.3
182	65-45-2		137.1	1.28	1.03	9.3	188	90-43-7		170.2	3.09	3.28	11.4
183	608-25-3		124.1	-	1.58	8.1	189	697-82-5		136.2	-	3.15	9.1
184	1435-71-8		257.2	-	5.27	11.9	190	88-24-4		368.6	-	8.95	15.3
185	1745-81-9		134.2	-	2.91	10.2	191	131-55-5		246.2	-	2.78	12.5
186	2432-14-6		265.9	-	3.84	9.4	192	2985-59-3		382.5	-	8.93	19.3

Table3 カテゴリーⅡ-Bに該当する物質(未点検既存化学物質) [続き]

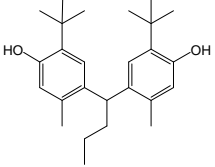
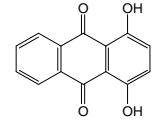
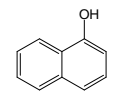
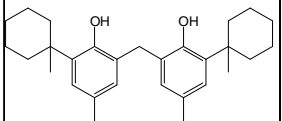
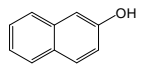
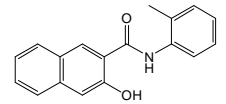
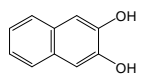
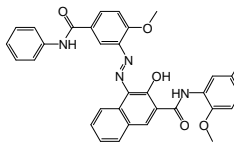
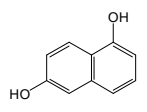
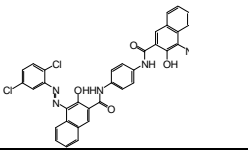
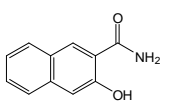
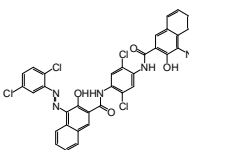
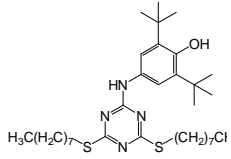
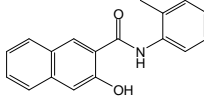
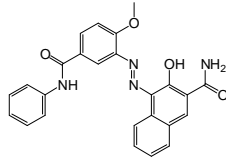
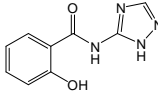
No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]	No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]
193	85-60-9		382.6	-	9.09	13.7	199	81-64-1		240.2	-	3.94	11.8
194	90-15-3		144.2	2.85	2.69	9.4	200	77-62-3		420.6	-	10.69	15.5
195	135-19-3		144.2	2.7	2.69	9.9	201	135-61-5		277.3	-	4.46	16.0
196	92-44-4		160.2	2.24	2.21	10.2	202	67990-05-0		581.0	-	8.24	22.4
197	575-44-0		160.2	1.94	2.21	10.2	203	3905-19-9		794.5	-	15.17	32.7
198	3665-51-8		187.2	-	2.21	11.4	204	40618-31-3		863.4	-	15.33	23.3

Table3 カテゴリーⅡ-Bに該当する物質(未点検既存化学物質) [続き]

No.	CAS No.	分子構造	分子量	logPow (実測値) [-]	logPow*3 (計算値) [-]	Dmax*4 [A]
205	991-84-4	 <chem>Cc1c(C)c(C)c(Nc2nc3c(ncn3S(CH2)7Cl)S(CH2)7C)c1</chem>	589.0	-	13.25	24.2
206	135-61-5	 <chem>CC(=O)Nc1ccc2cc(O)ccc2c1</chem>	277.3	-	4.46	16.0
207	56396-10-2	 <chem>CC(=O)Nc1ccc(OC)c1N=Nc2c(O)c(N)cc2c3ccccc3</chem>	440.5	-	5.82	16.1
208	36411-52-6	 <chem>Cc1ncn[nH]1NC(=O)c2ccc(O)cc2</chem>	204.2	-	1.75	12.7

用語集：

【BCFBFAFver.3.00】

アメリカの EPA で使用されているモデルで、以前開発された BCFWIN の改良版のプログラム。予測対象物質をイオン性と非イオン性に分類し、 $\log\text{Pow}$ - $\log\text{BCF}$ の相関式から生物濃縮係数 (BCF) を予測する。 $\log\text{Pow}$ の算出には KOWWIN を使用する。また、化学物質の魚類における生体内反応速度の予測や生物蓄積係数(BAF)を予測することも可能である。

【CERI モデル ver.2.18】

(財)化学物評価研究機構によって開発されたモデル。予測対象物質を分子構造によって予測困難物質、定性予測を行う物質、 $\log\text{Pow}$ - $\log\text{BCF}$ の相関式を用いて予測する物質に分類し、BCF の予測を行う。 $\log\text{Pow}$ の算出には ClogP を使用する。

【Baseline Model ver.5.100】

ブルガリアにある Prof. Assen Zlatarov 大学の Dimitrov らによって提唱されたモデル。このモデルでは、 $\log\text{Pow}$ で表される受動拡散の式から $\log\text{BCFmax}$ を算出し、この値から物質の代謝性、分子サイズ、解離性などで表される Mitigation Factor を引くことによって BCF の予測を行う。物質の代謝性は、論文等で公表されている Rat の代謝情報をデータベース化したシミュレータより求める。分子サイズは、自動生成されるいくつかの分子配座を初期構造とし、半経験的量子化学計算を用いて計算される最安定構造から算出する。量子化学計算には MOPAC、 $\log\text{Pow}$ の算出には KOWWIN を使用する。