

4. シミュレーションツール等 :

4.1 化学物質の物性予測(QSPR)

No	名称・URL等	著者等	提供等	年度等	特徴
A 冊子体					
1	物性定数推算法 第5版	佐藤一雄	丸善	1965	[化学物質の定数推算]
2	Chemical Property Estimation, Theory and Application	Braun, E.J./Grand Valley州立大学	Lewis Pulishers	1998	[化学物質の特性の推算ソフトウェアデータ源]
3	Illustrated Handbook of Physical Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals	Mackay, D., Shiu, W.Y., Ma, K.C.	Lewis Pulishers	1992-97	[環境での化学物質の動態解析]
4	Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behavior of Organic Compounds	Lyman, W.J., Reehl, W.F., Rosenblatt, D. H.	McGraw-Hill	1981	[化学物質の物性予測]
5	Octanol-Water Partition Coefficients: Fundamentals and Physical Chemistry	J. Sangster (Sangster Research Laboratory, Canada)	John Wiley & Sons	1997	[オクタノール・水 分配係数]
6	Physical Properties of Molecular Crystals, Liquids, and Glasses	A. Bondi	John Wiley & Sons	1968	[化学物質の物性予測]
7	The Properties of Gases and Liquids, 3rd ed.	R.C.Reid, J.M. Prausnitz & T.K. Sherwood	McGraw-Hill	1977	[化学物質の物性予測]
C インターネット					
1	http://www.engineering.usu.edu/uwrl		Utah 州立大学		[物性予測プログラムPEP] 構造と物性、物性と物性の関係が相関式により計算できる
D オンライン					
1	LOGKOW	Pomona大学	NUMERICA		[LOGKOW] 18,285種類の生物活性物質の27,709個の水-オクタノール分配係数(評価済み)を利用できる
2	CHEMEST	Lyman, et al	NUMERICA		[物性予測] 水溶解度、土壌吸着係数、生物濃縮因子、活量係数、沸点、蒸気圧、水からの蒸発速度、ヘンリー定数、融点、酸解離定数、液体粘度などが計算できる
E その他					
1	ACD/BP and VP Calculator v.3.50		ACD (http://www.acdlabs.com/)		[沸点、融点を求めるQSPRツール]
2	ACD/pKa Calculator v.3.50		ACD		[分離定数(pKa)を求めるQSPRツール]
3	ACD/LogP Calculator v.3.50		ACD		[オクタノール/水 分配係数を求めるQSPRツール]
4	ACD/LogD Suite		ACD		[特定のPH下での溶解度(logD)、BCF、Koc等を求めるQSPRツール]
5	pKalc 3.1		CompuDrug /ACS	1996	[分離定数(pKa)を求めるQSPRツール]

6	ProLogP	CompuDrug /ACS	[LogKowを求めるツール]
7	ProLogD	CompuDrug /ACS	[LogDを求めるツール]
8	MedChem ClogP Ver.3.5.3	MedChem	[LogKowを求めるツール]
9	PCCHEM	EPA	1987 [土壌・土砂吸着係数のQSPRツール]
10	ClogP Ver.2.0	BioBite/Daylight Chem. Inf. Systems	[Windows版 LogKowのツール]
11	MPBPVP	SRC	1995 [沸点、融点、蒸気圧を求めるQSPRツール]
12	AOPWIN	SRC	1995 [化学物質の大気中での酸化速度を求めるツール]
13	HENRY	SRC	1996 [ヘンリー定数を求めるツール]
14	HYDROWIN	SRC	[水中での加水分解速度を求めるツール]
15	BCFWIN	SRC	[生物濃縮性を求めるツール]
16	BIODEG	SRC	[生分解性を求めるツール]
17	Koc	SRC	[土壌・土砂吸着係数のツール]
18	Epi-Suite	SRC	[環境特性の予測ツール約10個を集めたもの]