

## 4. 2 化学物質の毒性予測(QSAR)

No	名称・URL等	著者等	提供等	年度等	特徴
<b>A 冊子体</b>					
1	QSAR手法を用いた化学物質の手計算によ	松尾昌季	エル・アイ・シー	1998-99	[QSARによる毒性、生態毒性予測] 毒性予測(哺乳動物)が7巻、生態毒性予測(環境 毒性予測)が3巻
<b>C インターネット</b>					
1	<a href="http://www.biobyte.com/~clogp/">http://www.biobyte.com/~clogp/</a>		Biobyte Corp.		[構造活性関連ツール等]
2	<a href="http://www.tds-tds.com">http://www.tds-tds.com</a>		Technical Database Services, Inc.		[TDS社のNUMERICA] QSARデータベースの他に、ECOTOX, ACQUIRE, ECDIN, DIPPR, LogKowなどが利用できる
3	<a href="http://mmlin1.pha.unc.edu/jin/QSAR">http://mmlin1.pha.unc.edu/jin/QSAR</a>		Univ. of North Carolina		[North Carolina大学の QSAR Web]
<b>D オンライン</b>					
1	QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship Program)		NUMERICA		[NUMERICAのQSAR] 分子量、分子屈折、体積、分配係数、融点、沸点、 蒸気圧、蒸発熱、解離定数、水溶解度などを求める ことができる
<b>E その他</b>					
1	SciQSAR	SciVision	住商エレクトロニクス		[構造活性関連ツール]
2	Sybyl/HQSAR	Tripos	住商エレクトロニクス		[ホログラム法の構造活性関連ツール] 多量データの解析
3	Sybyl/CoMFA	Tripos	住商エレクトロニクス		[3次元構造活性関連CoMFA法のツール]
4	TopKat Ver.5.0 (Toxicity Prediction by Komputer-Assisted Technology)	Oxford Molecular Design /HDI	ソニーエレクトロニクス等		[毒性データの解析・予測システム] 癌原性、変異原性、催奇性、生分解性など14モジュ ールあり
5	ECOSAR		U.S.EPA, SRC等		[水系毒性のQSARツール]
6	MULTICASE	MULTICASE (Klopman: Case Western Reserve大学)	MULTICASE		[QSAR解析のためのエキスパートシステム]