

QSAR Prediction Reporting Format (QPRF)

(version 1.1, May 2008)

The adequacy of a prediction depends on the following conditions: a) **the (Q)SAR model is scientifically valid:** the scientific validity is established according to the OECD principles for (Q)SAR validation; b) **the (Q)SAR model is applicable to the query chemical:** a (Q)SAR is applicable if the query chemical falls within the defined applicability domain of the model; c) **the (Q)SAR result is reliable:** a valid (Q)SAR that is applied to a chemical falling within its applicability domain provides a reliable result; d) **the (Q)SAR model is relevant for the regulatory purpose:** the predicted endpoint can be used directly or following an extrapolation, possibly in combination with other information, for a particular regulatory purpose.

A (Q)SAR prediction (model result) may be considered adequate if it is reliable and relevant, and depending on the totality of information available in a weight-of-evidence assessment (see Section 4 of the QPRF).

1. Substance

1.1. CAS number:

50-22-6

1.2. EC number:

200-019-6

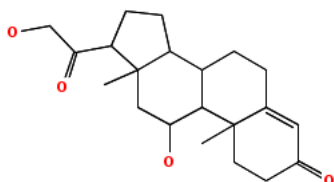
1.3. Chemical Name:

(11beta)-11,21-dihydroxypregn-4-ene-3,20-dione

1.4. Structural Formula:

N/A

1.5. Structure Codes:



a. SMILES:

```
[C@]12C[C@H](O)[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@]34C)[C@@H]1CC[C@@H]2C(=O)CO
```

b. InChI:

```
InChI=1S/C21H30O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h9,14-17,19,22,24H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16+,17-,19+,20-,21-/m0/s1  
InChI=1S/C21H30O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h9,14-17,19,22,24H,3-8,10-11H2,1-2H3
```

InChI=1S/C21H30O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h9,14-17,19,22,24H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15+,16-,17+,19-,20-,21-/m0/s1
InChI=1S/C21H29O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h9,14-17,19,22,24H,1,3-8,10-11H2,2H3/t14-,15+,16+,17-,19-,21-/m0/s1

c. Other structural representation:

SDF, MOL, and CML-formatted representations of this compound are available from the online location <http://apps.ideaconsult.net:8080/ambit2/compound/17/conformer/143852>

d. Stereochemical Features:

Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae; Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae;

2. General Information

Date of QPRF Report:

2004, June 3

2.1. QPRF Author and Contact Details:

Pantelis Sopasakis (NTUA), e-mail: chvng@mail.ntua.gr, URL: <http://opentox.ntua.gr>, Address: 45, Asdf Qwerty St., Ghjkl.

3. Prediction

3.1. EndPoint (OECD Principle 1)

a. Endpoint

b. Dependent Variable:

caco2

3.2. Algorithm (OECD Principle 2)

a. Model or Submodel Name

MLR model for caco2

b. Model Version

Date : 2004, June 3

Version Info : Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae;

c. Reference to QMRF

Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae;

d. Predicted Value (model result)

-10 mg / L

e. Predicted Value (comments)

Lorem Ipsum is simply dummy text of the printing and typesetting industry. Lorem Ipsum has been the industry's standard dummy text ever since the 1500s, when an unknown printer took a galley of type and scrambled it to make a type specimen book. It has survived not only five centuries, but also the leap into electronic typesetting, remaining essentially unchanged. It was popularised in the 1960s with the release of Letraset sheets containing Lorem Ipsum passages, and more recently with desktop publishing software like Aldus PageMaker including versions of Lorem Ipsum

3.3. Applicability Domain (OECD Principle 3)

a. Domains

i. descriptor domain

Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis,

quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae;

ii. structural fragment domain

Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae;

iii. mechanism domain

Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae;

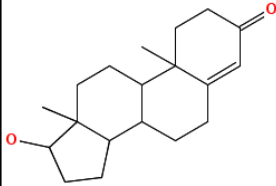
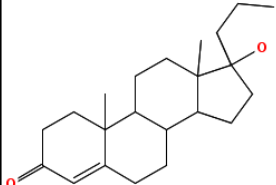
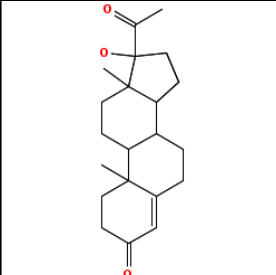
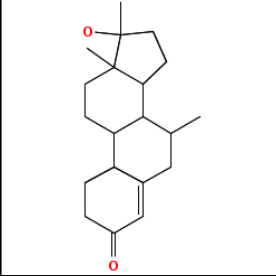
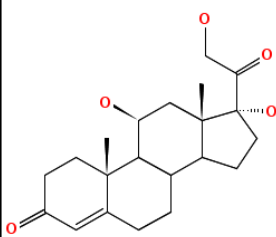
iv. metabolic domain, if relevant

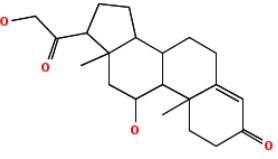
Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae;

Vivamus cursus tincidunt felis sed ultricies. Proin neque sem, pharetra et rhoncus pretium, suscipit quis tortor. Fusce facilisis, augue sed sollicitudin pulvinar, dolor massa egestas velit, a ultrices lectus odio quis eros. Nulla consequat dui eget leo luctus gravida. Phasellus eget placerat nulla. Duis quis lectus elit, porttitor blandit neque. Maecenas diam enim, rutrum quis accumsan vitae, feugiat

tempor tellus. Proin laoreet, risus non ultricies egestas, diam lacus commodo turpis, vitae sollicitudin tortor elit nec augue. Nunc tincidunt imperdiet libero, sit amet aliquet ipsum lobortis vel. Morbi varius rutrum nisl et mattis. Integer venenatis, metus ut ullamcorper posuere, sem nulla bibendum risus, non sollicitudin mi justo nec velit. Suspendisse convallis cursus quam sit amet porta. Nam ut erat ut ante bibendum pharetra vitae condimentum orci.

b. Structural Analogues

CAS	Structure	SMILES	Exp. Value
58-22-0		<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@]34C)[C@@H]1CC[C@@H]2O</chem>	-4.34
60607-35-4		<chem>CCC[C@]1(O)CC[C@H]2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)[C@H]3CCC12C</chem>	
68-96-2		<chem>CC(=O)[C@]1(O)CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C</chem>	
3704-09-4		<chem>C[C@@H]1CC2=CC(=O)CC[C@@H]2[C@H]3CC[C@@]4(C)[C@@H](CC[C@]4(C)O)[C@H]13</chem>	
		<chem>OCC(=O)[C@@]2(O)CC[C@H]3[C@@H]4CC\C1=C\C(=O)CC[C@]1(C)[C@H]4[C@@H](O)C[C@]23C</chem>	-4.66

50-22-6		<chem>C[C@]12C[C@H](O)[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@]34C)[C@@H]1CC[C@@H]2C(=O)CO</chem>	-4.47
---------	---	--	-------

4. Adequacy

The information provided in this section might be useful, depending on the reporting needs and formats of the regulatory framework of interest.

This information aims to facilitate considerations about the adequacy of the (Q)SAR prediction (result) estimate. A (Q)SAR prediction may or may not be considered adequate (“fit-for-purpose”), depending on whether the prediction is sufficiently reliable and relevant in relation to the particular regulatory purpose. The adequacy of the prediction also depends on the availability of other information, and is determined in a weight-of-evidence assessment.

4.1. Regulatory Purpose:

Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae;

Vivamus cursus tincidunt felis sed ultricies. Proin neque sem, pharetra et rhoncus pretium, suscipit quis tortor. Fusce facilisis, augue sed sollicitudin pulvinar, dolor massa egestas velit, a ultrices lectus odio quis eros. Nulla consequat dui eget leo luctus gravida. Phasellus eget placerat nulla. Duis quis lectus elit, porttitor blandit neque. Maecenas diam enim, rutrum quis accumsan vitae, feugiat tempor tellus. Proin laoreet, risus non ultricies egestas, diam lacus commodo turpis, vitae sollicitudin tortor elit nec augue. Nunc tincidunt imperdiet libero, sit amet aliquet ipsum lobortis vel. Morbi varius rutrum nisl et mattis. Integer venenatis, metus ut ullamcorper posuere, sem nulla bibendum risus, non sollicitudin mi justo nec velit. Suspendisse convallis cursus quam sit amet porta. Nam ut erat ut ante bibendum pharetra vitae condimentum orci.

4.2. Approach for regulatory interpretation of the model result:

Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis

mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae; Vivamus cursus tincidunt felis sed ultricies. Proin neque sem, pharetra et rhoncus pretium, suscipit quis tortor. Fusce facilisis, augue sed sollicitudin pulvinar, dolor massa egestas velit, a ultrices lectus odio quis eros. Nulla consequat dui eget leo luctus gravida. Phasellus eget placerat nulla. Duis quis lectus elit, porttitor blandit neque. Maecenas diam enim, rutrum quis accumsan vitae, feugiat tempor tellus. Proin laoreet, risus non ultricies egestas, diam lacus commodo turpis, vitae sollicitudin tortor elit nec augue. Nunc tincidunt imperdiet libero, sit amet aliquet ipsum lobortis vel. Morbi varius rutrum nisl et mattis. Integer venenatis, metus ut ullamcorper posuere, sem nulla bibendum risus, non sollicitudin mi justo nec velit. Suspendisse convallis cursus quam sit amet porta. Nam ut erat ut ante bibendum pharetra vitae condimentum orci.

4.3. Outcome:

Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae; Vivamus cursus tincidunt felis sed ultricies. Proin neque sem, pharetra et rhoncus pretium, suscipit quis tortor. Fusce facilisis, augue sed sollicitudin pulvinar, dolor massa egestas velit, a ultrices lectus odio quis eros. Nulla consequat dui eget leo luctus gravida. Phasellus eget placerat nulla. Duis quis lectus elit, porttitor blandit neque. Maecenas diam enim, rutrum quis accumsan vitae, feugiat tempor tellus. Proin laoreet, risus non ultricies egestas, diam lacus commodo turpis, vitae sollicitudin tortor elit nec augue. Nunc tincidunt imperdiet libero, sit amet aliquet ipsum lobortis vel. Morbi varius rutrum nisl et mattis. Integer venenatis, metus ut ullamcorper posuere, sem nulla bibendum risus, non sollicitudin mi justo nec velit. Suspendisse convallis cursus quam sit amet porta. Nam ut erat ut ante bibendum pharetra vitae condimentum orci.

4.4. Conclusion:

Maecenas ac tincidunt enim. Nulla facilisi. Nunc feugiat, erat vel ornare sollicitudin, augue risus ullamcorper nisi, et ullamcorper turpis tellus sit amet urna. In leo leo, dapibus vel ornare ac, rhoncus vehicula augue. Proin et leo sit amet magna sagittis vestibulum quis ac risus. Integer turpis quam, cursus et euismod eu, blandit ut erat. Vivamus posuere accumsan dui at mollis. Praesent iaculis, quam id ultricies accumsan, enim ipsum rutrum lacus, id placerat augue dolor id enim. Pellentesque id mattis mauris. Donec eu ipsum et arcu molestie aliquam et imperdiet justo. Morbi euismod luctus eros commodo pellentesque. Sed urna tortor, consequat id lacinia nec, sollicitudin vel ante. Quisque diam metus, convallis ac auctor et, venenatis id turpis. Cras id sodales tortor. Nunc non bibendum massa. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae;

Vivamus cursus tincidunt felis sed ultricies. Proin neque sem, pharetra et rhoncus pretium, suscipit quis tortor. Fusce facilisis, augue sed sollicitudin pulvinar, dolor massa egestas velit, a ultrices lectus odio quis eros. Nulla consequat dui eget leo luctus gravida. Phasellus eget placerat nulla. Duis quis lectus elit, porttitor blandit neque. Maecenas diam enim, rutrum quis accumsan vitae, feugiat tempor tellus. Proin laoreet, risus non ultricies egestas, diam lacus commodo turpis, vitae sollicitudin tortor elit nec augue. Nunc tincidunt imperdiet libero, sit amet aliquet ipsum lobortis vel. Morbi varius rutrum nisl et mattis. Integer venenatis, metus ut ullamcorper posuere, sem nulla bibendum risus, non sollicitudin mi justo nec velit. Suspendisse convallis cursus quam sit amet porta. Nam ut erat ut ante bibendum pharetra vitae condimentum orci.