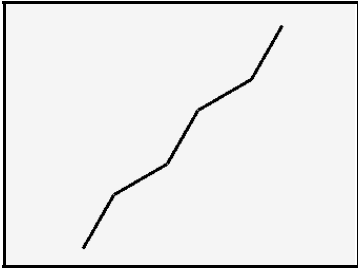
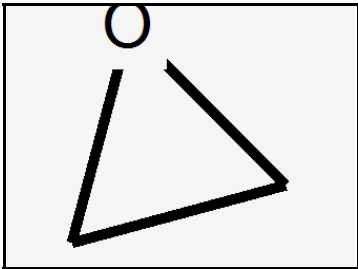
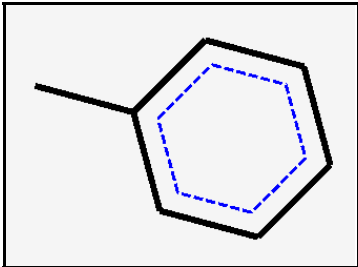
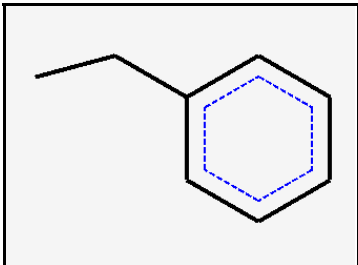
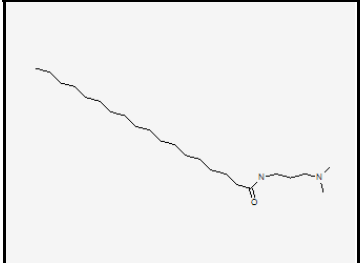
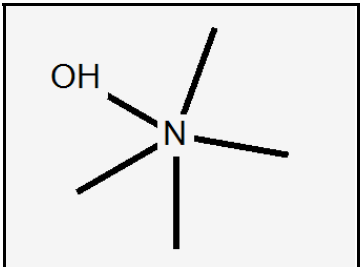
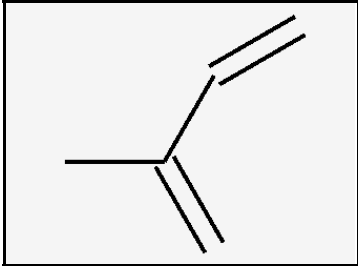
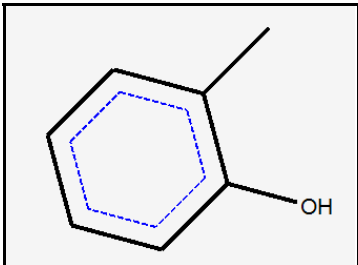
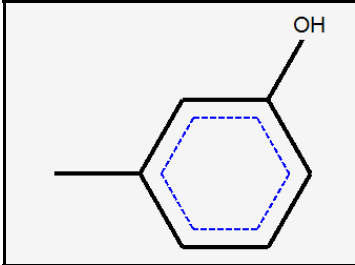
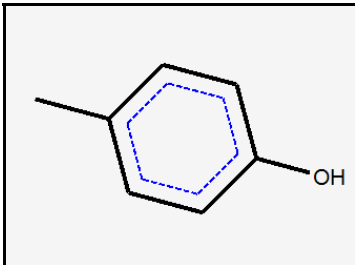


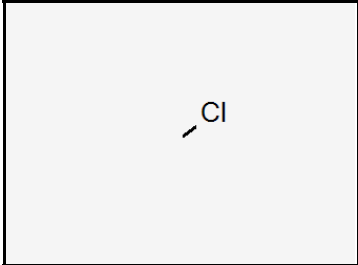
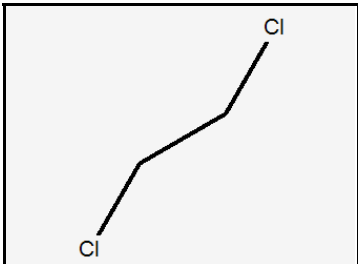
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
2	CAS番号 110-54-3 n-ヘキサン  備考: 優先通し番号 3    分子量 86.18    logP(KowWin) 3.288 ※2 対水溶解(mg/L) [予測値] 17.24 ※1    logBCFmaxtox 2.45E+0 ※3 LUMO(eV) 3.74E+0~3.81E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 2.5 mg/L	使用可 basesurface narcotics 19.1 mg/L	使用可 Neutral Organics 4.94 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 5.41 mg/L Neutral Organics 6.86 mg/L
		甲殻類	使用可 3.88 mg/L	使用可 basesurface narcotics 8.66 mg/L	使用可 Neutral Organics 3.16 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 1.49 mg/L Neutral Organics 2.95 mg/L
4	CAS番号 75-21-8 エチレンオキシド  備考: 優先通し番号 19    分子量 44.05    logP(KowWin) -0.045 ※2 対水溶解(mg/L) [予測値] 237400 ※1    logBCFmaxtox -3.39E-2 ※3 LUMO(eV) 2.71E+0~2.71E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 84 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3280 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEpoxydes, mono 57.7 mg/L Neutral Organic 2490 mg/L	使用可 epoxydes(ClogP) 3.30 mg/L
		甲殻類	使用可 212 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4510 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEpoxydes, mono 278 mg/L Neutral Organic 1170 mg/L	使用可 epoxydes(ClogP) 7.74 mg/L

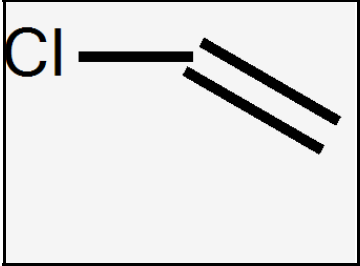
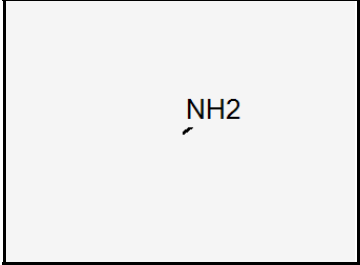
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
5	CAS番号 108-88-3 トルエン  備考: 優先通し番号 46  	魚類	使用可 5.8 mg/L	使用可 basesurface narcotics 21.5 mg/L	使用可 Neutral Organics 24.8 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 19.2 mg/L
		甲殻類	使用可 4.13 mg/L	使用可 basesurface narcotics 19.9 mg/L	使用可 Neutral Organics 14.8 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 6.92 mg/L
分子量 92.14      logP(KowWin) 2.54 ※2 対水溶解(mg/L)      logBCFmaxtox 1.9E+0 ※3 [予測値] 573.1 ※1      LUMO(eV) 5.2E-1~5.2E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
6	CAS番号 100-41-4 エチルベンゼン  備考: 優先通し番号 50  	魚類	使用可 4.2 mg/L	使用可 basesurface narcotics 9.90 mg/L	使用可 Neutral Organics 10.3 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 10.8 mg/L
		甲殻類	使用可 1.81 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 7.98 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 6.45 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 3.98 mg/L
分子量 106.17      logP(KowWin) 3.031 ※2 対水溶解(mg/L)      logBCFmaxtox 2.26E+0 ※3 [予測値] 228.6 ※1      LUMO(eV) 5.29E-1~5.37E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

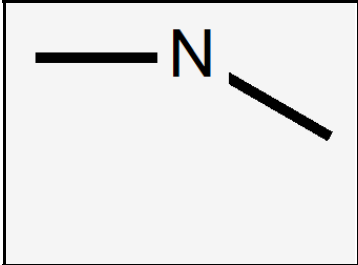
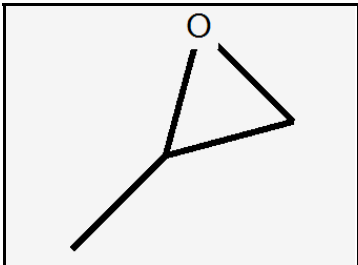
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
7	CAS番号 7651-02-7 N-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアルアミド  備考: 優先通し番号 153 アミン類  	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 basesurface narcotics 0.277 mg/L	使用可 Aliphatic Amines 0.0220 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) ○ Amides 0.0160 mg/L Neutral Organic 0.00500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 secondary or tertiary amines 0.0141 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	0.381 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.0892 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Aliphatic Amines 0.00500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) ○ Amides 0.00154 mg/L Neutral Organic 0.00400 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 secondary or tertiary amines 24.5 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
分子量 368.65     logP(KowWin) 7.35 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.32E+0 ※3 [予測値] 0.002525 ※1     LUMO(eV) 1.37E+0~1.7E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
8	CAS番号 75-59-2 テトラメチルアンモニウム=ヒドロキド  備考: 優先通し番号 17  	魚類	462 mg/L	使用可	使用不可 Neutral Organics 781000 mg/L ※N;構造適用範囲外	QSARモデルなし
		甲殻類	3 mg/L	使用可	使用不可 Neutral Organics 294000 mg/L ※N;構造適用範囲外	QSARモデルなし
分子量 91.15     logP(KowWin) -2.474 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox ※3 [予測値] 1000000 ※1     LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
9	<b>9</b> <b>イソプレン</b> CAS番号 <b>78-79-5</b> 備考: 優先通し番号 5 	魚類	使用可 7.43 mg/L	使用可 basesurface narcotics 14.4 mg/L	使用可 Neutral Organics 16.9 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 14.6 mg/L Neutral Organics 21.2 mg/L
		甲殻類	使用可 5.77 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 13.3 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 10.1 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 2.66 mg/L Neutral Organics 6.80 mg/L
10	<b>10.1</b> <b>o-クレゾール</b> CAS番号 <b>95-48-7</b> 備考: 優先通し番号 156(クレゾールとして) 	魚類	使用可 7 mg/L	使用可 phenols and anilines 24.2 mg/L	使用可 OPhenols 16.9 mg/L Neutral Organic 78.5 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 18.9 mg/L
		甲殻類	使用可 9.5 mg/L	使用可 phenols and anilines 12.5 mg/L	使用可 OPhenols 5.23 mg/L Neutral Organic 44.8 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 5.96 mg/L

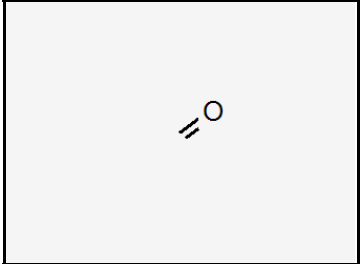
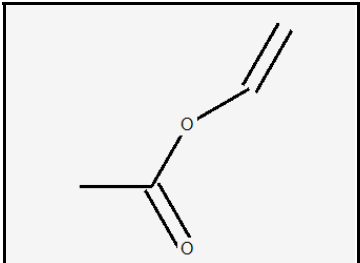
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
10	<b>10.2</b> m-クレゾール CAS番号 108-39-4  備考: 優先通し番号 156(クレゾールとして)    分子量 108.14    logP(KowWin) 2.06 ※2 対水溶解(mg/L)    logBCFmaxtox 1.54E+0 ※3 [予測値] 8890 ※1    LUMO(eV) 3.74E-1~3.74E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 3.88 mg/L	使用可 phenols and anilines 24.3 mg/L	使用可 OPhenols 16.9 mg/L Neutral Organic 78.5 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 18.9 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用可 phenols and anilines 12.5 mg/L	使用可 OPhenols 5.23 mg/L Neutral Organic 44.8 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 5.96 mg/L
		魚類	使用可 14 mg/L	使用可 phenols and anilines 24.9 mg/L	使用可 OPhenols 16.9 mg/L Neutral Organic 78.5 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 18.9 mg/L
		甲殻類	使用可 7 mg/L	使用可 phenols and anilines 12.8 mg/L	使用可 OPhenols 5.23 mg/L Neutral Organic 44.8 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 5.96 mg/L
10	<b>10.3</b> p-クレゾール CAS番号 106-44-5  備考: 優先通し番号 156(クレゾールとして)    分子量 108.14    logP(KowWin) 2.06 ※2 対水溶解(mg/L)    logBCFmaxtox 1.54E+0 ※3 [予測値] 9246 ※1    LUMO(eV) 4.26E-1~4.26E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 14 mg/L	使用可 phenols and anilines 24.9 mg/L	使用可 OPhenols 16.9 mg/L Neutral Organic 78.5 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 18.9 mg/L
		甲殻類	使用可 7 mg/L	使用可 phenols and anilines 12.8 mg/L	使用可 OPhenols 5.23 mg/L Neutral Organic 44.8 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 5.96 mg/L
		魚類	使用可 14 mg/L	使用可 phenols and anilines 24.9 mg/L	使用可 OPhenols 16.9 mg/L Neutral Organic 78.5 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 18.9 mg/L
		甲殻類	使用可 7 mg/L	使用可 phenols and anilines 12.8 mg/L	使用可 OPhenols 5.23 mg/L Neutral Organic 44.8 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 5.96 mg/L

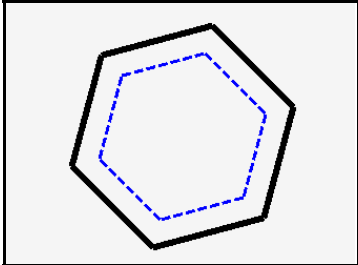
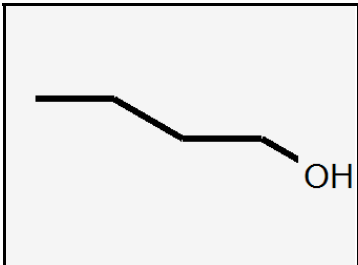
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
11	CAS番号 74-87-3 クロロメタン(別名塩化メチル)  備考: 優先通し番号 6  	魚類	使用可 900 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 282 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 274 mg/L	使用不可 halides3 141 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 200 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 335 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 143 mg/L	使用不可 halides3 65.2 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			分子量 50.49	logP(KowWin) 1.087 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 8.11E-1 ※3		
			[予測値] 22620 ※1	LUMO(eV) 1.6E+0~1.6E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
12	CAS番号 107-06-2 1,2-ジクロロエタン  備考: 優先通し番号 11  	魚類	使用可 118 mg/L	使用可 basesurface narcotics 93.3 mg/L	使用可 Neutral Organics 115 mg/L	使用可 halides3 72.0 mg/L
		甲殻類	使用可 99.4 mg/L	使用可 basesurface narcotics 103 mg/L	使用可 Neutral Organics 64.4 mg/L	使用可 halides3 31.0 mg/L
			分子量 98.96	logP(KowWin) 1.832 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 1.37E+0 ※3		
			[予測値] 6414 ※1	LUMO(eV) 6.85E-1~1.13E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

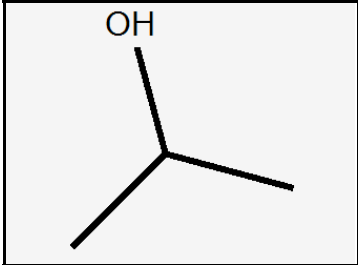
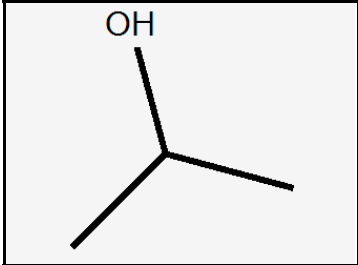
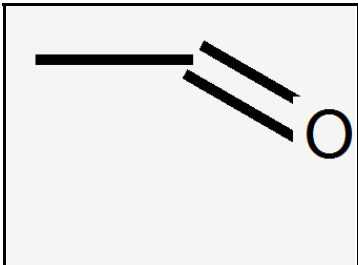
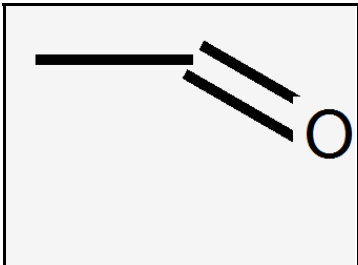
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
13	CAS番号 75-01-4 クロロエチレン  備考: 優先通し番号 13  	魚類	使用可 210 mg/L	使用可 basesurface narcotics 93.6 mg/L	使用可 ○Vinyl/Allyl Halides 26.7 mg/L Neutral Organic 112 mg/L	使用可 halides3 66.3 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 basesurface narcotics 107 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Vinyl/Allyl Halides 21.1 mg/L Neutral Organic 61.4 mg/L	使用可 halides3 29.1 mg/L
	分子量 62.5 対水溶解(mg/L) [予測値] 5631 ※1 logP(KowWin) 1.623 ※2 logBCFmaxtox 1.21E+0 ※3 LUMO(eV) 8.56E-1~8.56E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
14	CAS番号 74-89-5 メチルアミン  備考: 優先通し番号 15 アミン類  	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 narcotic amines 432 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 323 mg/L Neutral Organic 5980 mg/L	使用可 primary amines aliphatic 328 mg/L
		甲殻類	使用可 702 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 15300 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 28.3 mg/L Neutral Organic 2660 mg/L	使用可 primary amines aliphatic 48.8 mg/L
	分子量 31.06 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -0.638 ※2 logBCFmaxtox -4.76E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

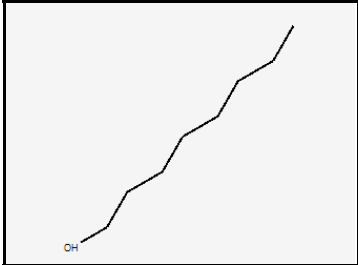
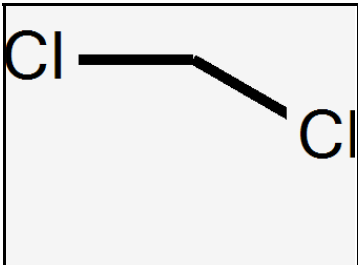
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
15	CAS番号 124-40-3 ジメチルアミン  備考: 優先通し番号 16 アミン類  	魚類	使用可 17 mg/L	使用可 narcotic amines 309 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 232 mg/L Neutral Organic 3310 mg/L	使用可 secondary or tertiary amines 278 mg/L
		甲殻類	使用可 50 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7430 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 21.5 mg/L Neutral Organic 1540 mg/L	使用可 secondary or tertiary amines 30.0 mg/L ※f:使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
16	CAS番号 75-56-9 1,2-エポキシプロパン(別名酸化プロピレン)  備考: 優先通し番号 20  	魚類	使用可 52 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1910 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Epoxides, mono 45.0 mg/L Neutral Organic 1380 mg/L	使用可 epoxides(ClogP) 3.28 mg/L
		甲殻類	使用可 350 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2360 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Epoxides, mono 188 mg/L Neutral Organic 675 mg/L	使用可 epoxides(ClogP) 6.83 mg/L

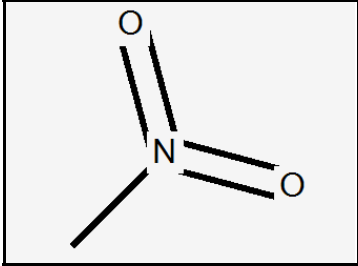
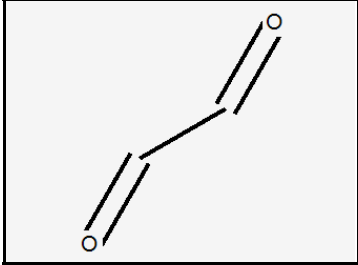


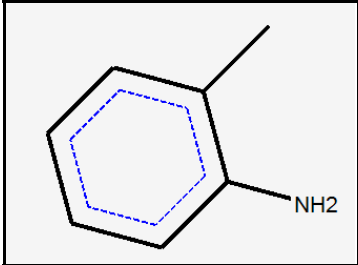
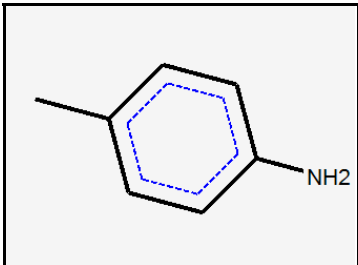
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
17	CAS番号 50-00-0 ホルムアルデヒド  備考: 優先通し番号 25  	魚類	使用可 100 mg/L	使用可 aldehydes 18.2 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 12.5 mg/L Neutral Organic 748 mg/L	使用可 aldehydes 11.3 mg/L
		甲殻類	使用可 14.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 790 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 46.1 mg/L Neutral Organic 365 mg/L	使用可 aldehydes 13.0 mg/L
分子量 30.03      logP(KowWin) 0.35 ※2 対水溶解(mg/L)      logBCFmaxtox 2.61E-1 ※3 [予測値] 57020 ※1      LUMO(eV) ※4 ODDI 2.84E-1~2.84E-1 ※5 Qc ※6						
18	CAS番号 108-05-4 酢酸ビニル  備考: 優先通し番号 28  	魚類	使用可 2.39 mg/L	使用可 esters 113 mg/L	使用可 Esters 63.7 mg/L ○ Vinyl/Allyl Esters 1.04 mg/L Neutral Organic 982 mg/L	使用可 conjugated systems2 7.24 mg/L
		甲殻類	使用可 9.22 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 928 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 152 mg/L ○ Vinyl/Allyl Esters 14.9 mg/L Neutral Organic 496 mg/L	使用可 conjugated systems2 12.0 mg/L
分子量 86.09      logP(KowWin) 0.728 ※2 対水溶解(mg/L)      logBCFmaxtox 5.43E-1 ※3 [予測値] 30250 ※1      LUMO(eV) 5.02E-1~8.58E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

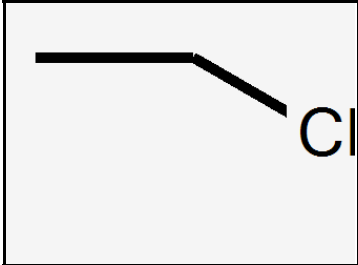
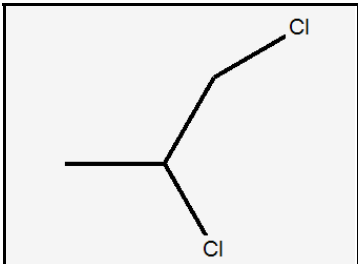
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
19	CAS番号 71-43-2 ベンゼン  備考: 優先通し番号 45    分子量 78.11 logP(KowWin) 1.993 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.49E+0 ※3 [予測値] 2000 ※1 LUMO(eV) 5.54E-1~5.54E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 5.9 mg/L	使用可 basesurface narcotics 51.5 mg/L	使用可 Neutral Organics 65.1 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 36.3 mg/L
		甲殻類	使用可 10 mg/L	使用可 basesurface narcotics 55.6 mg/L	使用可 Neutral Organics 36.9 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 12.7 mg/L
20	CAS番号 71-36-3 1-ブタノール  備考: 優先通し番号 124    分子量 74.12 logP(KowWin) 0.841 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 6.27E-1 ※3 [予測値] 76700 ※1 LUMO(eV) 3.55E+0~3.6E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 1376 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1490 mg/L	使用可 Neutral Organics 669 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 1290 mg/L Neutral Organics 656 mg/L
		甲殻類	使用可 1328 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1400 mg/L	使用可 Neutral Organics 341 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 252 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 103 mg/L

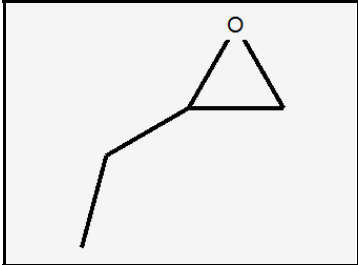
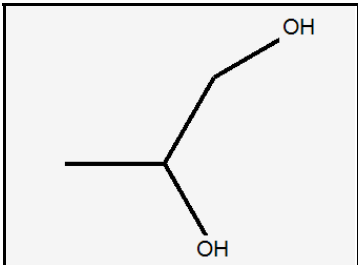
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
21	CAS番号 67-63-0 プロピルアルコール (イソプロピルアルコール)		使用可	使用可	使用可	使用可
			9640 mg/L	basesurface narcotics 3410 mg/L	Neutral Organics 1740 mg/L	Alcohols aliphatic 3170 mg/L Neutral Organics 1580 mg/L
21	備考: 優先通し番号 102		使用可	使用不可	使用可	使用不可
			2285 mg/L	basesurface narcotics 3770 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	Neutral Organics 844 mg/L	alcohols aliphatic 468 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 196 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
	分子量 60.1 対水溶解(mg/L) [予測値] 402400 ※1 logP(KowWin) 0.276 ※2 logBCFmaxtox 2.06E-1 ※3 LUMO(eV) 3.49E+0~3.49E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
22	CAS番号 75-07-0 アセトアルデヒド		使用可	使用可	使用可	使用可
			30.8 mg/L	aldehydes 41.6 mg/L	Aldehydes (Mono) 34.3 mg/L Neutral Organic 3190 mg/L	aldehydes 29.4 mg/L
22	備考: 優先通し番号 26		使用可	使用不可	使用可	使用可
			29.7 mg/L	Reactive unspecified 3560 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	Aldehydes (Mono) 163 mg/L Neutral Organic 1480 mg/L	aldehydes 36.2 mg/L
	分子量 44.05 対水溶解(mg/L) [予測値] 256800 ※1 logP(KowWin) -0.166 ※2 logBCFmaxtox -1.24E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.93E-1~2.93E-1 ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
23	CAS番号 111-87-5 オクタン-1-オール  備考: 優先通し番号 103  	魚類	使用可 12.2 mg/L	使用可 basesurface narcotics 62.6 mg/L	使用可 Neutral Organics 20.2 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 47.9 mg/L Neutral Organics 26.3 mg/L
		甲殻類	使用可 26 mg/L	使用可 basesurface narcotics 34.1 mg/L	使用可 Neutral Organics 12.4 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 24.8 mg/L Neutral Organics 9.24 mg/L
	分子量 130.23    logP(KowWin) 2.805 ※2 対水溶解(mg/L) 814 ※1    logBCFmaxtox 2.09E+0 ※3 [予測値]    LUMO(eV) 3.42E+0~3.6E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
24	CAS番号 75-09-2 ジクロロメタン(別名塩化メチレン)  備考: 旧3監通し番号 160 優先通し番号 7  	魚類	使用可 193 mg/L	使用可 basesurface narcotics 194 mg/L	使用可 Neutral Organics 273 mg/L	使用可 halides3 150 mg/L
		甲殻類	使用可 27 mg/L	使用可 basesurface narcotics 250 mg/L	使用可 Neutral Organics 146 mg/L	使用不可 halides3 67.8 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
	分子量 84.93    logP(KowWin) 1.34 ※2 対水溶解(mg/L) 10950 ※1    logBCFmaxtox 1.E+0 ※3 [予測値]    LUMO(eV) 5.94E-1~5.94E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

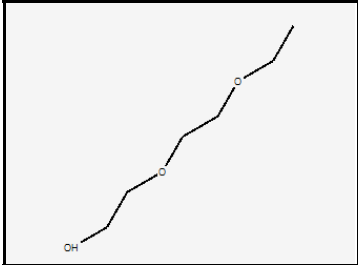
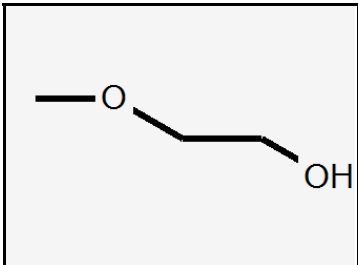
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
25	CAS番号 75-52-5 ニトロメタン  備考: 優先通し番号 18  	魚類	使用可 > 659.2 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1360 mg/L	使用可 Neutral Organics 3390 mg/L	使用不可 Unclassified 569 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 450 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 2900 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1590 mg/L	使用不可 Unclassified 90.1 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
26	CAS番号 107-22-2 オキサールアルデヒド(グリオキサール)  備考: 優先通し番号 112  	魚類	使用可 > 200 mg/L	使用可 aldehydes 351 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Poly) 21.6 mg/L Neutral Organic 91500 mg/L	使用不可 aldehydes 205 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 162 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 77000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Poly) 38.0 mg/L Neutral Organic 37100 mg/L	使用不可 aldehydes 301 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
27	<b>27</b> CAS番号 <b>95-53-4</b> <b>o</b> -トルイジン(別名:2-メチルアニリン)  備考: 優先通し番号 57 アミン類  	魚類	使用可 151 mg/L	使用可 phenols and anilines 56.0 mg/L	使用可 ○Anilines (Hindered) 67.2 mg/L Neutral Organic 192 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols5 52.2 mg/L
		甲殻類	使用可 15.6 mg/L	使用不可 phenols and anilines 22.2 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Hindered) 23.3 mg/L Neutral Organic 105 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols5 6.64 mg/L
28	<b>28</b> CAS番号 <b>106-49-0</b> <b>p</b> -トルイジン  備考: 優先通し番号 155 アミン類  	魚類	使用可 118 mg/L	使用可 phenols and anilines 56.5 mg/L	使用可 ○Anilines (Unhindered) 28.0 mg/L Neutral Organic 192 mg/L	使用可 primary amines aliphatic 53.9 mg/L
		甲殻類	使用可 0.12 mg/L	使用不可 phenols and anilines 22.3 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.772 mg/L Neutral Organic 105 mg/L	使用可 primary amines aliphatic 4.91 mg/L

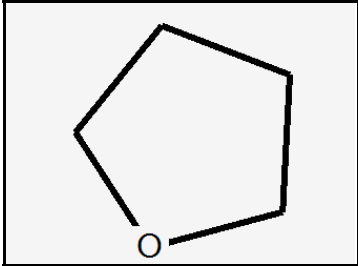
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
29	CAS番号 75-00-3 クロロエタン  備考: 優先通し番号 10  	魚類	使用可 2250 mg/L	使用可 basesurface narcotics 138 mg/L	使用可 Neutral Organics 127 mg/L	使用可 halides3 74.2 mg/L
		甲殻類	使用可 58 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 144 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 69.3 mg/L	使用可 halides3 32.8 mg/L
	分子量 64.52 logP(KowWin) 1.578 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.18E+0 ※3 [予測値] 8218 ※1 LUMO(eV) 1.5E+0~1.5E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
30	CAS番号 78-87-5 1, 2-ジクロロプロパン  備考: 優先通し番号 12  	魚類	使用可 127 mg/L	使用可 basesurface narcotics 48.7 mg/L	使用可 Neutral Organics 55.4 mg/L	使用可 halides3 38.7 mg/L
		甲殻類	使用可 29.5 mg/L	使用可 basesurface narcotics 47.9 mg/L	使用可 Neutral Organics 32.2 mg/L	使用可 halides3 16.0 mg/L
	分子量 112.99 logP(KowWin) 2.249 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.68E+0 ※3 [予測値] 2166 ※1 LUMO(eV) 6.85E-1~1.12E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
31	CAS番号 106-88-7 1,2-エポキシブタン  備考: 優先通し番号 21  	魚類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 946 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEpoxydes, mono 30.1 mg/L Neutral Organic 622 mg/L	使用可 epoxydes(ClogP) 2.93 mg/L
		甲殻類	69.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1020 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEpoxydes, mono 107 mg/L Neutral Organic 318 mg/L	使用可 epoxydes(ClogP) 5.29 mg/L
	分子量 72.11 logP(KowWin) 0.863 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 6.44E-1 ※3 [予測値] 24650 ※1 LUMO(eV) 2.63E+0~2.66E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
32	CAS番号 57-55-6 プロピレングリコール  備考: 優先通し番号 106  	魚類	51400 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 27100 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 19700 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 32100 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 15300 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	43500 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 42800 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 8650 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 2800 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 1230 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
	分子量 76.1 logP(KowWin) -0.782 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -5.83E-1 ※3 [予測値] 811100 ※1 LUMO(eV) 3.14E+0~3.25E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					



#	化学物質	対象	毒性値							
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9				
33	CAS番号 111-90-0 2-(2-エトキシエトキシ)エタノール  備考: 優先通し番号 110  	魚類	使用可 ca 11775 mg/L	使用可 basesurface narcotics 27400 mg/L	使用可 Neutral Organics 28700 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 47200 mg/L Neutral Organics 22600 mg/L				
		甲殻類	使用可 1982 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 48700 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 12700 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 4310 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 1880 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)				
			分子重	134.18	logP(KowWin)	-0.69 ※2				
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	-5.15E-1 ※3				
			[予測値]	828000 ※1	LUMO(eV)	2.24E+0~2.87E+0 ※4				
					ODDI	※5				
					Qc	※6				
34	CAS番号 109-86-4 エチレングリコールモノメチルエーテル  備考: 優先通し番号 23  	魚類	使用可 14977 mg/L	使用可 basesurface narcotics 29200 mg/L	使用可 Neutral Organics 25500 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 41000 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 19500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)				
		甲殻類	使用可 27000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 50700 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 11100 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 3360 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 1480 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)				
			分子重	76.1	logP(KowWin)	-0.907 ※2				
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	-6.76E-1 ※3				
			[予測値]	1000000 ※1	LUMO(eV)	2.77E+0~3.05E+0 ※4				
					ODDI	※5				
					Qc	※6				

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
35	CAS番号 109-59-1 2-(1-メチルエトキシ)エタノール	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 6860 mg/L	使用可 Neutral Organics 5330 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 9420 mg/L ※f:使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 4630 mg/L
			備考: 優先通し番号 24	甲殻類	使用可 > 970 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 9410 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)
	分子量 104.15 対水溶解(mg/L) [予測値] 333200 ※1	logP(KowWin) 0.002 ※2 logBCFmaxtox 1.49E-3 ※3 LUMO(eV) 2.63E+0~2.98E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6				
36	CAS番号 111-76-2 2-ブトキシエタノール	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 2710 mg/L	使用可 Neutral Organics 1880 mg/L	使用可 ○alcohols aliphatic 3520 mg/L Neutral Organics 1770 mg/L
			備考: 優先通し番号 109	甲殻類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 3160 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)
	分子量 118.18 対水溶解(mg/L) [予測値] 64470 ※1	logP(KowWin) 0.567 ※2 logBCFmaxtox 4.23E-1 ※3 LUMO(eV) 2.64E+0~3.E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6				

#	化学物質	対象	毒性値																						
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9																			
37	CAS番号 109-99-9 テトラヒドロフラン	魚類	使用可 2160 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1010 mg/L	使用可 Neutral Organics 534 mg/L	使用可 Oethers aliphatic 897 mg/L Neutral Organics 530 mg/L																			
			甲殻類	使用可 3485 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 983 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 275 mg/L	使用可 Neutral Organics 86.4 mg/L																		
備考: 優先通し番号 135  		<table border="1"> <tr> <td>分子量</td> <td>72.11</td> <td>logP(KowWin)</td> <td>0.937 ※2</td> </tr> <tr> <td>対水溶解(mg/L)</td> <td></td> <td>logBCFmaxtox</td> <td>6.99E-1 ※3</td> </tr> <tr> <td>[予測値]</td> <td>54480 ※1</td> <td>LUMO(eV)</td> <td>3.11E+0~3.11E+0 ※4</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td>ODDI</td> <td>※5</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td>Qc</td> <td>※6</td> </tr> </table>				分子量	72.11	logP(KowWin)	0.937 ※2	対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	6.99E-1 ※3	[予測値]	54480 ※1	LUMO(eV)	3.11E+0~3.11E+0 ※4			ODDI	※5			Qc	※6
分子量	72.11	logP(KowWin)	0.937 ※2																						
対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	6.99E-1 ※3																						
[予測値]	54480 ※1	LUMO(eV)	3.11E+0~3.11E+0 ※4																						
		ODDI	※5																						
		Qc	※6																						

予測値の選択

QSARクラス複数該当の場合は、下記の順番で条件に合う予測結果(○印付記)を用いることが望ましい。

- ・※P※F※D※N(使用不能)が無いクラスの予測結果
- ・※f(使用留意)が無いクラスの予測結果(KATEのみ)
- ・より限定されたクラスの予測結果
- ・Neutral Organicsクラス以外の予測結果
- ・予測値がより小さいクラスの予測結果

また、予測結果の信頼性が低い以下のクラスは使用不可とした

- ・TIMES : Reactive Unspecified
- ・KATE : Unclassified

※1 Wskowin v1.42により算出

※2 KowWin v1.68により算出

※3~7 TIMES v2.27.15 により算出. 魚類エンドポイント: Pimephales Promelas 96h LC50. 甲殻類エンドポイント: Daphnia Magna 48h EC50.

量子化学計算はコンフォマーの生成は行わず、MOPAC (AM1 PRECISE )により実行。

LUMO : the energy of the lowest unoccupied molecular orbital

BCFmaxtox : the maximum bioconcentration factor

ODDI: the donor delocalizability of the aldehyde O-atom

QC : the charge of the C atom from  $\alpha$ ,  $\beta$ -unsaturated alcohols

※8 ECOSAR v1.11により算出. 魚類エンドポイント: Fish 96h LC50. 甲殻類エンドポイント: Daphnid 48h LC50. logPはKowWin※2を使用。

すべてのクラスにおいてbaseline toxicityとしてNeutral organicクラスに適用された結果も予測される。

※9 KATE on PAS により算出. 魚類エンドポイント: Fish 96h LC50. 甲殻類エンドポイント: Daphnid 48h EC50.logPはKowWin※2を使用。

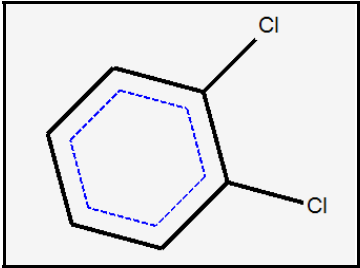
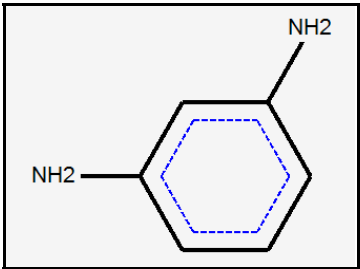
※P: 予測物質のlogPが、予測物質が分類されるクラスの参照物質のlogP集合から外れており、回帰式の有効範囲外である。<使用不可>

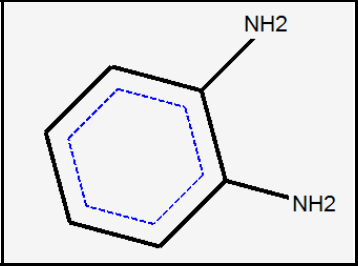
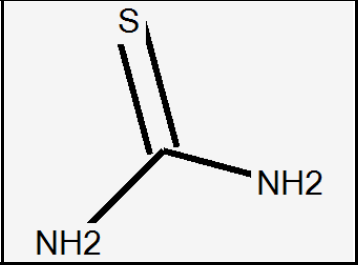
※D: Out of Domain (TIMES) <使用不可>

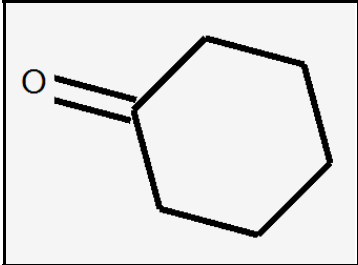
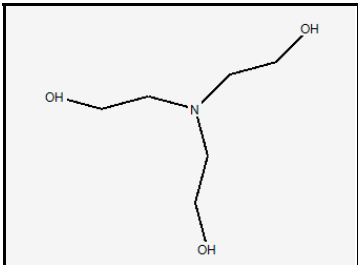
※N: Not Related to an Existing ECOSAR Class Definition (ECOSAR)<使用不可>

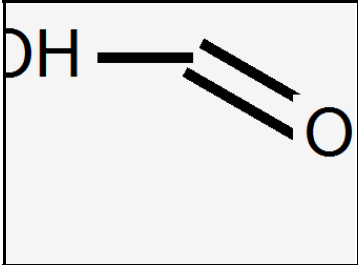
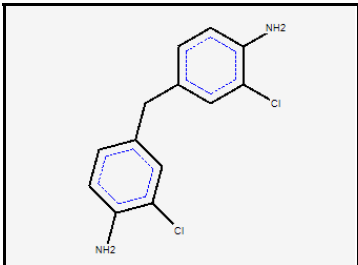
※F: 予測物質の部分構造について、予測物質が分類されるクラス及びNeutralOrganicsクラス(麻酔作用で毒性を説明可能なクラス)の参照物質の部分構造集合に含まれないため、回帰式の適用範囲外である。(KATE)<使用不可>

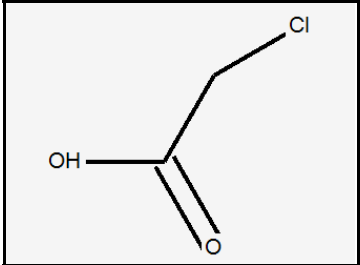
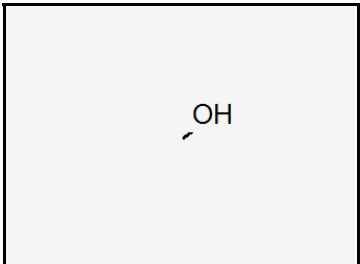
※f: 予測物質の部分構造について、予測物質が分類されるクラスの参照物質に含まれない部分構造を持つが、当該部分構造はNeutralOrganicsクラス(単純な麻酔作用のみで毒性が説明される)の参照物質の部分構造集合に含まれるため、予測結果の使用においては部分構造について留意する必要がある。(KATE)<使用留意>

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
1	CAS番号 o-ジクロロベンゼン  備考: 旧三監通し番号:23 優先通し番号:52  	魚類	使用可 3.8 mg/L	使用可 basesurface narcotics 6.46 mg/L	使用可 Neutral Organics 8.52 mg/L	使用可 halides3 7.80 mg/L
		甲殻類	使用可 1.4 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 5.39 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 5.45 mg/L	使用可 halides3 2.92 mg/L
	分子量 147 対水溶解(mg/L) [予測値] 92.03 ※1 logP(KowWin) 3.282 ※2 logBCFmaxtox 2.45E+0 ※3 LUMO(eV) -1.43E-1~-1.43E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
2	CAS番号 m-フェニレンジアミン  備考: 旧三監通し番号:88 優先通し番号:55 アミン類  	魚類	使用可 100 mg/L	使用不可 phenols and anilines 1740 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 714 mg/L Anilines (amino-meta) 2340 mg/L Neutral Organic 12500 mg/L	使用不可 amines aromatic or phenols3 15.4 mg/L ※P, ※F:使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 2 mg/L	使用不可 phenols and anilines 234 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.815 mg/L Anilines (amino-meta) 5.39 mg/L Neutral Organic 5680 mg/L	使用不可 amines aromatic or phenols1 0.882 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
	分子量 108.14 対水溶解(mg/L) [予測値] 211000 ※1 logP(KowWin) -0.391 ※2 logBCFmaxtox -2.92E-1 ※3 LUMO(eV) 7.46E-1~7.46E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

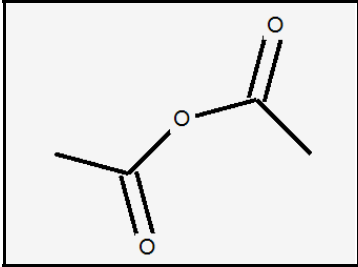
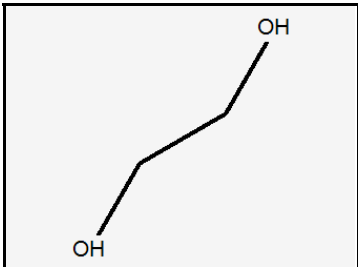
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
3	CAS番号 3 ーフェニレンジアミン  備考: 旧三監通し番号:64 優先通し番号:56 アミン類  	魚類	使用可 4.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2270 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (amino-ortho) 44.1 mg/L Neutral Organic 4000 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols3 12.2 mg/L
		甲殻類	使用可 1.4 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4090 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (amino-ortho) 0.882 mg/L Neutral Organic 1920 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols3 0.956 mg/L
4	CAS番号 4 チオ尿素  備考: 旧三監通し番号:173 優先通し番号:40  	魚類	使用可 110 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 21900 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Thioureas 418000 mg/L Neutral Organic 58700 mg/L	使用不可 Unclassified 6380 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 9 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 63100 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Thioureas 9.08 mg/L Neutral Organic 24600 mg/L	使用不可 Unclassified 637 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
5	CAS番号 108-94-1 シクロヘキサノン	魚類	使用可 527 mg/L	使用可 basesurface narcotics 384 mg/L	使用可 Neutral Organics 491 mg/L	使用可 Oketones 370 mg/L Neutral Organics 502 mg/L
			備考: 優先通し番号:131	甲殻類	使用可 800 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 500 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)
						
	分子量 98.15 対水溶解(mg/L) [予測値] 24080 ※1 logP(KowWin) 1.126 ※2 logBCFmaxtox 8.4E-1 ※3 LUMO(eV) 9.22E-1~9.32E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
6	CAS番号 102-71-6 トリエタノールアミン	魚類	使用可 11800 mg/L	使用可 narcotic amines 33900 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 25000 mg/L Neutral Organic 1280000 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 36100 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			備考: 優先通し番号:108 アミン類	甲殻類	使用可 1390 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2570000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
						
	分子量 149.19 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -2.476 ※2 logBCFmaxtox -1.85E+0 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
7	CAS番号 64-18-6 ギ酸  備考: 優先通し番号:117    分子量 46.03 logP(KowWin) -0.461 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -3.44E-1 ※3 [予測値] 955200 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.99E-1~2.99E-1 ※5 Qc ※6	魚類	信頼性あるデータなし	使用不可 aldehydes 53.7 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 6130 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 acids 4470 mg/L ※P, ※F:使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	32.19 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7370 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 2770 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 acids 75.6 mg/L ※P, ※F:使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
8	CAS番号 4, 4'-ジアミノ-3, 3'-ジクロロジフェニルメタン (別名4, 4'-メチレンビス(2-クロロアニリン))  備考: 旧三監通し番号:76 優先通し番号:73 アミン類    分子量 267.16 logP(KowWin) 3.47 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.59E+0 ※3 [予測値] 8.684 ※1 LUMO(eV) 2.09E-1~2.67E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	0.61 mg/L	使用不可 phenols and anilines 5.26 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 3.60 mg/L Neutral Organic 10.5 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols1 0.517 mg/L
		甲殻類	0.92 mg/L	使用不可 phenols and anilines 5.84 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 1.85 mg/L Neutral Organic 6.82 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols3 2.40 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
9	CAS番号 3926-62-3 モノクロル酢酸ソーダ  備考: 優先通し番号:95 審査対象物質はNa塩だが 酸に代替し予測  	魚類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 1330 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OHalo Acids 2560 mg/L Neutral Organic 2400 mg/L	使用不可 Unclassified 459 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	427 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2130 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OHalo Acids 189 mg/L Neutral Organic 1170 mg/L	使用不可 Unclassified 83.3 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
10	CAS番号 67-56-1 メタノール  備考: 優先通し番号:90  	魚類	使用可 11850 mg/L	使用可 basesurface narcotics 11200 mg/L	使用可 Neutral Organics 6090 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 10100 mg/L Neutral Organics 4830 mg/L
		甲殻類	> 10000 mg/L	使用可 basesurface narcotics 15400 mg/L	使用可 Neutral Organics 2710 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 945 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 412 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
	分子量 94.5 対水溶解(mg/L) [予測値] 195300 ※1 logP(KowWin) 0.341 ※2 logBCFmaxtox 2.54E-1 ※3 LUMO(eV) 1.32E-1~4.71E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
	分子量 32.04 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -0.632 ※2 logBCFmaxtox -4.72E-1 ※3 LUMO(eV) 3.78E+0~3.78E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					



#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
11	CAS番号 108-24-7 無水酢酸  備考: 優先通し番号:93    分子量 102.09 logP(KowWin) -0.577 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -4.31E-1 ※3 [予測値] 358800 ※1 LUMO(eV) 1.54E-1~5.29E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 7040 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 17300 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 Unclassified 2420 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	3200 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 16800 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 7750 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 Unclassified 314 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
12	CAS番号 107-21-1 エチレングリコール  備考: 優先通し番号:105    分子量 62.07 logP(KowWin) -1.2 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -8.95E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 3.14E+0~3.24E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	> 100 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 48300 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 38100 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 59500 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 27900 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	> 1100 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 86000 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 16100 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 4210 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 1880 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9

予測値の選択

QSARクラス複数該当の場合は、下記の順番で条件に合う予測結果(○印付記)を用いることが望ましい。

- ※P:※F:※D:※N(使用不能)が無いクラスの予測結果
- ※f(使用留意)が無いクラスの予測結果(KATEのみ)
- より限定されたクラスの予測結果
- Neutral Organicsクラス以外の予測結果
- 予測値がより小さいクラスの予測結果

また、予測結果の信頼性が低い以下のクラスは使用不可とした

- TIMES : Reactive Unspecified
- KATE : Unclassified

※1 Wskowwin v1.42lにより算出

※2 KowWin v1.68lにより算出

※3~7 TIMES v2.27.15 により算出. 魚類エンドポイント: Pimephales Promelas 96h LC50. 甲殻類エンドポイント: Daphnia Magna 48h EC50. 量子化学計算はコンフォマーの生成は行わず、MOPAC (AM1 PRECISE )により実行。

LUMO : the energy of the lowest unoccupied molecular orbital

BCFmaxtox : the maximum bioconcentration factor

ODDI: the donor delocalizability of the aldehyde O-atom

QC : the charge of the C atom from  $\alpha$  ,  $\beta$  - unsaturated alcohols

※8 ECOSAR v1.11lにより算出. 魚類エンドポイント: Fish 96h LC50. 甲殻類エンドポイント: Daphnid 48h LC50. logPはKowWin※2を使用.

すべてのクラスにおいてbaseline toxicityとしてNeutral organicクラスに適用された結果も予測される。

※9 KATE on PAS により算出. 魚類エンドポイント: Fish 96h LC50. 甲殻類エンドポイント: Daphnid 48h EC50.logPはKowWin※2を使用.

※P: 予測物質のlogPが、予測物質が分類されるクラスの参照物質のlogP集合から外れており、回帰式の有効範囲外である。〈使用不可〉

※D: Out of Domain (TIMES) 〈使用不可〉

※N: Not Related to an Existing ECOSAR Class Definition (ECOSAR)〈使用不可〉

※F: 予測物質の部分構造について、予測物質が分類されるクラス及びNeutralOrganicsクラス(麻酔作用で毒性を説明可能なクラス)の参照物質の部分構造集合に含まれないため、回帰式の適用範囲外である。(KATE)〈使用不可〉

※f: 予測物質の部分構造について、予測物質が分類されるクラスの参照物質に含まれない部分構造を持つが、当該部分構造はNeutralOrganicsクラス(単純な麻酔作用のみで毒性が説明される)の参照物質の部分構造集合に含まれるため、予測結果の使用においては部分構造について 留意する必要がある。(KATE)〈使用留意〉