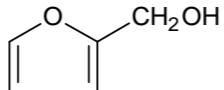


平成29年度デフォルト適用候補物質

(1) 平成29年度デフォルト適用を検討する物質(8物質)

番号	CAS番号	名称	構造	平成29年度暴露クラス(生態)		デフォルト適用検討の理由		参考: QSAR予測結果			
				難分解性 または 分解性不 明	良分解性	有害性情 報なし	情報の信 頼性なし	ECOSAR ^{*1}		KATE ^{*2}	
								甲殻類急性 (mg/L)	魚類急性 (mg/L)	甲殻類急性 (mg/L)	魚類急性 (mg/L)
1	26635-75-6	Poly(oxy-1,2-ethanediyl), .alpha.-[2-[(1- oxododecyl)amino]ethyl]- .omega.-hydroxy-	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_{10}-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{NH}-\text{CH}_2\text{CH}_2-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{OH}$	3	4	○		12.3	17.5	8.6	21
2	33939-64-9	ナトリウム = - (カルボ キシラトメチル) - - (ドデカン - 1 - イルオキシ) ポリ (オキシエチレ ン)	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_{11}(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{O}-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{O}^- \text{Na}^+$	3	4	○		判定不能	判定不能	構造 ×	構造 ×
3	98-00-0	フルフリルアルコール		4	4		○ ^{*3}	489	697	構造 ×	440
4	3164-85-0	カリウム = 2 - エチルヘキ サノアート	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{O}^- \text{K}^+$ $\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_3-\text{CH}-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{O}^- \text{K}^+$	4	4		○ ^{*3}	判定不能	判定不能	41	45
5	68920-66-1	Alcohols, C16-18 and C18- unsatd., ethoxylated	$\text{R}-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{OH}$ R:炭素数16~18の飽和又は不飽和アルキル	4	4		○ ^{*3}	logP ×	logP ×	3.4 (水溶解度超の ため使用不可)	2.1 (水溶解度超の ため使用不可)
6	68439-49-6	Alcohols, C16-18, ethoxylated	$\text{C}_m\text{H}_{2m+1}(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{OH}$ m=16~18	3	4		○ ^{*3}	QSAR予測せず	QSAR予測せず	QSAR予測せず	QSAR予測せず
7	9005-00-9	Poly(oxy-1,2-ethanediyl), .alpha.-octadecyl- .omega.-hydroxy-	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_{17}(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{OH}$	4	5		○ ^{*3}	QSAR予測せず	QSAR予測せず	QSAR予測せず	QSAR予測せず
8	78-23-9	3 - ヒドロキシ - 2 , 2 - ビス (ヒドロキシメチル) プロピル = ステアラート	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_{16}-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{O}-\text{CH}_2-\underset{\text{CH}_2\text{OH}}{\overset{\text{CH}_2\text{OH}}{\text{C}}}$	3	3	○		logP ×	logP ×	logP ×	logP ×

*1 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 v1.68を使用。

*2 KATE on NET 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 v1.68を使用。

*3 . . . 別添参照

