優先評価化学物質候補のQSAR予測結果

目次

No.	物質名等	CAS RN	ページ
1	[２－ヒドロキシ－N，N－ビス（２－ヒドロキシエチル）－N－メチルエタン－１－アミニウムと飽和脂肪酸（C＝１０～２０、直鎖型）又は不飽和脂肪酸（C＝１６～１８、直鎖型）とのエステル化反応生成物]の塩	単位検討物質 91995-81-2、157905-74-3、94095-35-9、32208-04-1	1
2	N，N－ジポリオキシエチレン－N－アルキル（C8～１８、直鎖型）アミン（数平均分子量が1,000未満のものに限る。）	単位検討物質 31017-83-1、68155-33-9、71786-60-2、61791-14-8、26635-92-7、61790-82-7、31727-16-9	24
3	ナトリウム＝２－オキソプロパノアート	113-24-6	45
4	４－トリルメタノール	589-18-4	46
5	ポリ（オキシメチレン）	30525-89-4	47
6	Acetic acid, 2-sulfo-, dodecyl ester, sodium salt (1:1)	1847-58-1	48
7	N－エチルアニリン	103-69-5	49
8	Isononanol (9CI)	27458-94-2	50
9	クロロアセトアルデヒド	107-20-0	51
10	１，２，４－トリアゾール	MITI 5-5776(288-88-0)	52
11	2-Propenamide, N-(hydroxy methyl)-	924-42-5	53
12	Poly(oxy-1,2-ethanediyl), α-(1-oxooctadecyl)-ω-hydroxy-	9004-99-3	54
13	Poly(oxy-1,2-ethanediyl), α-[(9Z)-1-oxo-9-octadecen-1-yl]-ω-hydroxy-	9004-96-0	55
14	Propanoic acid, 3,3'-thiobis-	111-17-1	56
15	２－イソブチル－４－メチルテトラヒドロ－2H－ピラン－４－オール	MITI5-7058(63500-71-0)	57
16	１－ブトキシ－２－プロパノール	5131-66-8	58
17	Phenol, 4-nitro-, sodium salt (1:1)	824-78-2	59
18	テトラキス{[（2E）－３，７－ジメチルオクター２，６－ジエン－１－イル]オキシ}シランを主成分（70％以上）とする、テトラエトキシシランと（2E）－３，７－ジメチルオクター２，６－ジエン－１－オールの反応生成物（分子構造中に（2E）－３，７－ジメチルオクター２，６－ジエン'-1-イル基を３つ以上含むものに限る。）	MITI2-4205	60
19	エチレンビス（ジアセトアミド）	MITI2-3577(10543-57-4)	61
20	1,3-Propanediol, 2,2-bis(hydroxymethyl)-	115-77-5	62
21	４－（４－{[[[（2E）－３，７－ジメチルオクター２，６－ジエン－１－イル]オキシ}（ビス{[（1R，2S，5R）－２－イソ'プロピル－'5－メチルシクロヘキシル]オキシ}）シリル]オキシ}フェニル）ブタン－２－オンを主成分とする、（1R，2S，5R）－２－イソプロピル'－５－メチルシクロヘキサン－１－オールと（2E）－３，７－ジメチルオクター２，６－ジエン－１－オールとテトラエトキシシランと４－（４－ヒドロキシフェニル）ブタン－２－オンの反応生成物（分子構造中に（1R，2S，5R）－２－イソプロピル－５－メチルシクロヘキシル基又は４－（３－オキソブチル）フェニル基又は（2E）－３，７－ジメチルオクター２，６－ジエン－１－イル基を合計３つ以上含むものに限る。）	MITI3-4686	63
22	Heptadecane	629-78-7	64
23	[２－（クロロメチル）オキシラン・４，４'－（プロパン－２，２－ジイル）ジフェノール重縮合物]・４－tert－ブチルフェノール・４，４'－（プロパン－２，２－ジイル）ジフェノール重付加物	MITI7-3448	65
24	２－テトラデシルオキシラン	7320-37-8	70
25	Oxirane, 2-dodecyl-	3234-28-4	71
26	Oxirane, 2-decyl-	2855-19-8	72
27	Urea, N'-(3,4-dichlorophenyl-N,N-dimethyl-	330-54-1(旧三監211)	73
28	tert-Dodecanethiol	25103-58-6	74
29	1H-Isoindole-1,3(2H)-dione, 2-(cyclohexylthio)-	17796-82-6	75
30	Benzene, diethyl-	25340-17-4	76
31	1H-Indene	95-13-6	79
32	Benzenemethanamine, N,N-dimethyl-	103-83-3	80
	KATE QSARクラスの詳細情報（Verify QSAR画面抜粋）		82

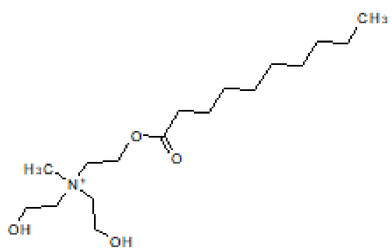
No.1を構成する物質および組成

CAS RN	名称	区分	炭素数									
			10	12	14	16	18	20	16:1(Δ9)	18:1(Δ9)	18:2(Δ9,12)	18:3(Δ9,12,15)
91995-81-2	脂肪酸(C＝10～20、不飽和C＝16～18)と2，2'，2''－ニトリロトリエタノールの反応生成物のジメチル＝スルファート四級化物	モノエステル	1-1	○	○	1-2	1-3	1-4	1-5	1-6	○	1-7
		ジエステル	1-8	○	○	1-9	1-10	1-11	1-12	1-13	○	1-14
		トリエステル	1-15	○	○	1-16	1-17	1-18	1-19	1-20	○	1-21
157905-74-3	脂肪酸(C＝16～18、不飽和C＝18)と2－ヒドロキシ－N，N－ビス(2－ヒドロキシエチル)－N－メチルエタンアミニウム＝メチル＝スルファートのエステル	モノエステル				1-2	1-3			1-6	○	1-7
		ジエステル				1-9	1-10			1-13	○	1-14
		トリエステル				1-16	1-17			1-20	○	1-21
94095-35-9	9-Octadecenoic acid (Z)-, reaction products with triethanolamine, di-Me sulfate-quaternized	モノエステル								1-6		
		ジエステル								1-13		
		トリエステル								1-20		
32208-04-1	2－ヒドロキシ－N－メチル－N，N－ビス[2－(ステアロイルオキシ)エチル]エタンアミニウム＝メチル＝スルファート						1-10					

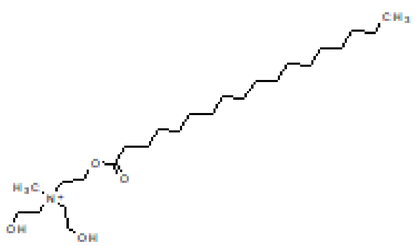
・ ［　　］はQSAR予測を行った脂肪酸の組み合わせを示した。
・ 91995-81-2を構成する物質は他の3CAS RNを構成する物質と重複している。重複している物質について下記の色で表した。

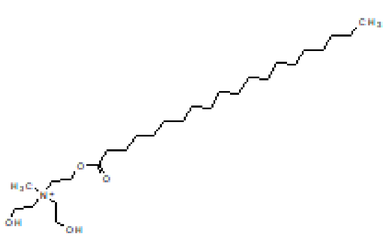
	157905-74-3を構成する物質
	94095-35-9を構成する物質
	32208-04-1を構成する物質
	91995-81-2と94095-35-9を構成する物質
	91995-81-2と32208-04-1を構成する物質

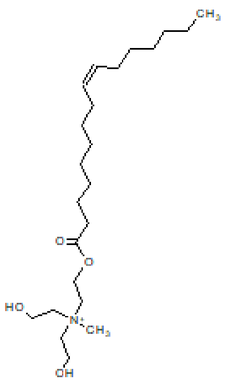
優先評価化学物質候補のQSAR予測結果

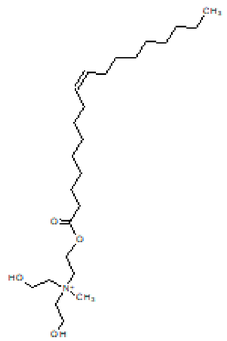
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムと飽和脂肪酸(C＝10～20、直鎖型)又は不飽和脂肪酸(C＝16～18、直鎖型)とのエステル化反応生成物]の塩 単位検討物質 CAS RN **91995-81-2、157905-74-3、94095-35-9、32208-04-1**						
1-1	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC10脂肪酸モノエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 318.47 水溶解度(mg/L) ※1 77222.79 logP(Kow Win) ※1 0.94 logBCFmaxtox ※2 7.E-1 LUMO(eV) ※3 -4.15E+0～-3.55E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCO)CCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=210* (74 ～ 595) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 177.65	**使用可** ○ n+, N+ 20 (0.26～ 1600) COS_X ester unreactive 220 (26～ 1800)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 16.7	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=642* (196 ～ 2099) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 413.77	**使用可** ○ n+, N+ 4.2 (0.036～ 500) COS_X ester unreactive 470 (60～ 3700) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 500 (53～ 4700) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 384.01	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 50 (2.3～ 1100) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=923* (103 ～ 8310) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 208.38	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1800 (150～ 22000) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 37.83	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 490 (36～ 6700) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)

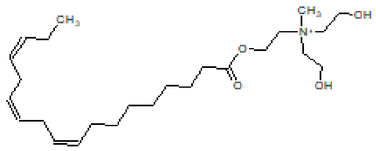
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-2	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC16脂肪酸モノエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 402.63 水溶解度(mg/L) ※1 72.52 logP(Kow Win) ※1 3.88 logBCFmaxtox ※2 2.9E+0 LUMO(eV) ※3 -4.08E+0～-3.53E+0 O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCO)CCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=1.0925*(0.392 ～ 3.048) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 4.27	**使用可** ○ n+, N+ 0.73 (0.0065～ 81) COS_X ester unreactive 5.0 (0.61～ 41)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.216	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=1.4306*(0.468 ～ 4.373) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 7.26	**使用可** ○ n+, N+ 0.14 (0.00092～ 23) COS_X ester unreactive 12 (1.5～ 89) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 12 (1.3～ 110) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 2.89	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.4 (0.084～ 22) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=4.91*(0.57 ～ 42.2) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.29	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 9.4 (1.1～ 77) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 1.08	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 2.2 (0.19～ 25) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)

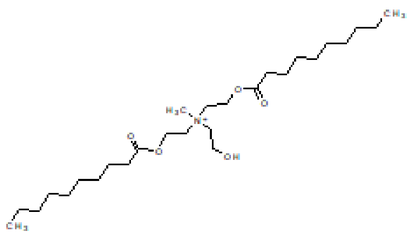
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-3	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC18脂肪酸モノエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 430.69 水溶解度(mg/L) ※1 7.03 logP(Kow Win) ※1 4.87 logBCFmaxtox ※2 3.62E+0 LUMO(eV) ※3 -3.91E+0～-3.44E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCO)CCCCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=0.2039*(0.073 ～ 0.568) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.22	**使用可** ○ n+, N+ 0.24 (0.0017～ 32) COS_X ester unreactive 1.4 (0.16～ 12) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.050	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=0.1973*(0.063 ～ 0.617) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.87	**使用可** ○ n+, N+ 0.046 (0.00024～ 9.1) COS_X ester unreactive 3.3 (0.39～ 28) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 3.4 (0.34～ 35) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.559	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.40 (0.022～ 7.2) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=0.85*(0.097 ～ 7.44) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.504	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.6 (0.17～ 15) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 0.328	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 0.36 (0.028～ 4.7) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)

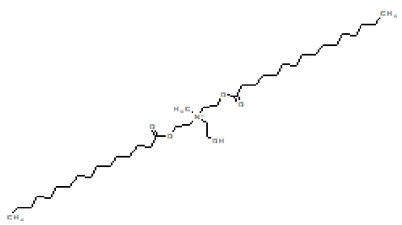
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-4	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC20脂肪酸モノエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 458.74 水溶解度(mg/L) ※1 0.68 logP(Kow Win) ※1 5.85 logBCFmaxtox ※2 4.27E+0 LUMO(eV) ※3 -4.11E+0～-3.51E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCO)CCCCCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=0.0392*(0.014 ～ 0.110) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Esters 0.347 ※logP>5.0	**使用不可** n+, N+ 0.077 (0.00045～ 13) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.40 (0.041～ 3.8) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.012	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=0.0306*(0.009 ～ 0.101) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Esters 0.477 ※logP>5.0	**使用不可** n+, N+ 0.015 (0.000058～ 3.8) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.95 (0.095～ 9.4) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.96 (0.081～ 11) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.108	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.12 (0.0054～ 2.6) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=0.15*(0.016 ～ 1.33) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.110	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 0.27 (0.023～ 3.3) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 0.099	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 0.059 (0.0036～ 0.94) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

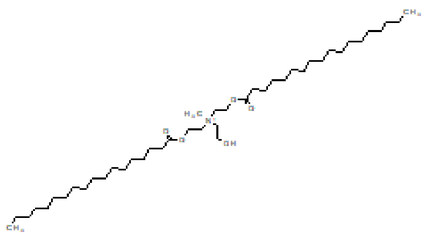
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-5	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウム C16:1(Δ9)脂肪酸モノエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 400.62 水溶解度(mg/L) ※1 113.92 logP(Kow Win) ※1 3.67 logBCFmaxtox ※2 2.74E+0 LUMO(eV) ※3 -4.13E+0～-3.59E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCO)CCCCCCC/C=C¥CCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=1.5931*(0.571 ～ 4.449) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 5.68	**使用可** ○ n+, N+ 0.94 (0.0087～ 100) COS_X ester unreactive 6.7 (0.82～ 54)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.301	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=2.2337*(0.732 ～ 6.820) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 9.87	**使用可** ○ n+, N+ 0.19 (0.0012～ 28) COS_X ester unreactive 15 (2.0～ 120) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 16 (1.8～ 140) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 4.17	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.8 (0.11～ 28) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=7.28*(0.85 ～ 62.5) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 3.22	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 14 (1.7～ 110) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 1.42	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 3.3 (0.29～ 37) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)

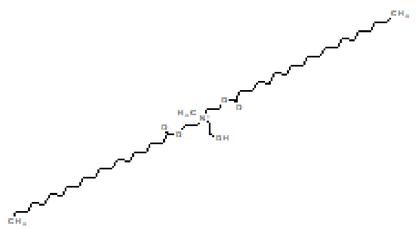
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-6	[2-ヒドロキシ-N, N-ビス(2-ヒドロキシエチル)-N-メチルエタン-1-アミニウム C18:1(Δ9)脂肪酸モノエステル メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 428.67 水溶解度(mg/L) ※1 11.04 logP(Kow Win) ※1 4.65 logBCFmaxtox ※2 3.46E+0 LUMO(eV) ※3 -4.03E+0～-3.51E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCO)CCCCCCC/C=C¥CCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=0.2860*(0.103 ～ 0.798) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.62	**使用可** ○ n+, N+ 0.31 (0.0024～ 40) COS_X ester unreactive 1.9 (0.22～ 16) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.070	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=0.2993*(0.096 ～ 0.932) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.54	**使用可** ○ n+, N+ 0.060 (0.00032～ 11) COS_X ester unreactive 4.4 (0.53～ 37) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 4.5 (0.46～ 45) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.809	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.53 (0.030～ 9.2) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=1.26*(0.14 ～ 11) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.709	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 2.4 (0.26～ 21) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 0.43	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 0.54 (0.043～ 6.8) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)

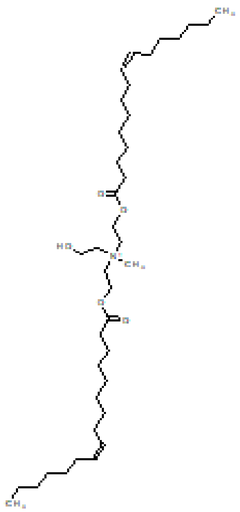
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-7	[2-ヒドロキシ-N, N-ビス(2-ヒドロキシエチル)-N-メチルエタン-1-アミニウム C18:3(Δ9,12,15)脂肪酸モノエステル メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 424.64 水溶解度(mg/L) ※1 27.25 logP(Kow Win) ※1 4.22 logBCFmaxtox ※2 3.15E+0 LUMO(eV) ※3 -3.89E+0～-3.47E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCO)CCCCCCC/C=C¥C/C=C¥C/C=C¥CC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=0.6678* (0.240 ～ 1.858) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.86	**使用可** ○ n+, N+ 0.51 (0.0043～ 61) COS_X ester unreactive 3.3 (0.40～ 28)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.135	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=0.7705* (0.252 ～ 2.354) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 4.69	**使用可** ○ n+, N+ 0.10 (0.00060～ 17) COS_X ester unreactive 7.7 (0.97～ 62) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 8.0 (0.85～ 75) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 1.69	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.92 (0.056～ 15) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=2.77* (0.32 ～ 23.9) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.40	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 5.3 (0.62～ 44) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 0.74	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.2 (0.10～ 14) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)

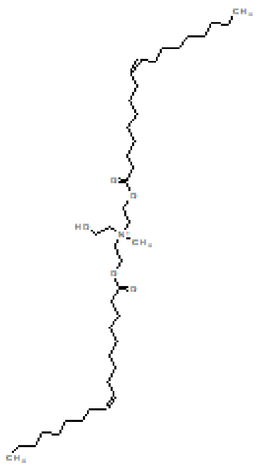
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-8	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC10脂肪酸ジエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 472.72 水溶解度(mg/L) ※1 1.17 logP(Kow Win) ※1 5.47 logBCFmaxtox ※2 4.04E+0 LUMO(eV) ※3 -3.97E+0～-3.54E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCOC(CCCCCCCCC)=O)CCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=0.0768*(0.028 ～ 0.214) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Esters 0.598 ※logP>5.0	**使用不可** n+, N+ 0.13 (0.00081～ 20) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.69 (0.074～ 6.4) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.022	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=0.0640*(0.020 ～ 0.206) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Esters 0.858 ※logP>5.0	**使用不可** n+, N+ 0.024 (0.00011～ 5.6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 1.6 (0.17～ 15) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.7 (0.15～ 19) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.217	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.20 (0.010～ 4.1) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=0.31*(0.034 ～ 2.74) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.211	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 0.57 (0.053～ 6.2) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 0.167	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 0.13 (0.0086～ 1.8) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

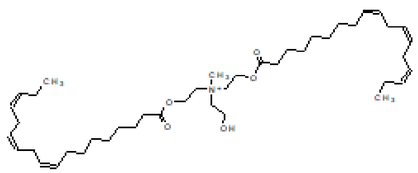
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-9	[2-ヒドロキシ-N, N-ビス(2-ヒドロキシエチル)-N-メチルエタン-1-アミニウムC16脂肪酸ジエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 641.04 水溶解度(mg/L) ※1 8.7831E-07 logP(Kow Win) ※1 11.36 logBCFmaxtox ※2 1.45E+0 LUMO(eV) ※3 -3.88E+0～-3.47E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCOC(CCCCCCCCCCCCCCC)=O)CCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=72.1861* (25.780 ～ 202.129) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.00029 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 0.00014 (1.5E-7～ 0.13) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.00031 (1.2E-5～ 0.0081) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 3.1E-6 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=159.0372* (51.731 ～ 488.935) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.00022 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 2.4E-5 (1.2E-8～ 0.049) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.00083 (2.2E-5～ 0.031) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.0008 (1.6E-5～ 0.040) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 1.0E+5 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.00013 (6.6E-7～ 0.024) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=7.4E-6* (5.1E-7 ～ 0.00011) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.2E-5 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.3E-5 (9.7E-8～ 0.0017) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 0.00012 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 2.2E-6 (1.8E-8～ 0.00026) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

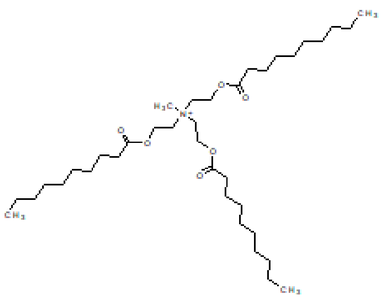
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-10	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC18脂肪酸ジエステル　メチルスルファート CAS RN **32208-04-1** 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 697.15 水溶解度(mg/L) ※1 7.8347E-09 logP(Kow Win) ※1 13.32 logBCFmaxtox ※2 -1.76E-2 LUMO(eV) ※3 -4.E+0～-3.52E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCOC(CCCCCCCCCCCCCCCCC)=O)CCCCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=2964* (1040 ～ 8452) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.3E-5 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 1.4E-5 (7.6E-9～ 0.026) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 2.3E-5 (5.6E-7～ 0.00096) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 1.6E-7 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=11638* (3360 ～ 40298) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.4E-5 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 2.4E-6 (4.8E-10～ 0.012) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 6.5E-5 (9.5E-7～ 0.0044) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 6.2E-5 (6.5E-7～ 0.0059) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 3.7E-7 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.1E-5 (2.1E-8～ 0.0053) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=2.1E-7 (±1.1E-8) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.0E-6 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 3.6E-07 (9.9E-10～0.00013) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 1.0E-5 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 5.5E-8 (1.9E-10～1.6E-5) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

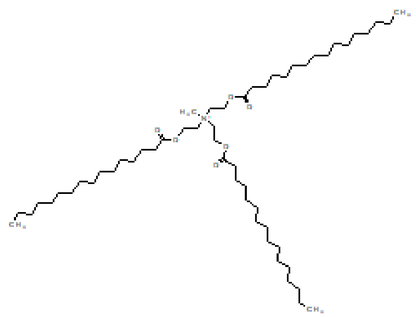
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-11	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC20脂肪酸ジエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 753.25 水溶解度(mg/L) ※1 6.943E-11 logP(Kow Win) ※1 15.29 logBCFmaxtox ※2 -1.48E+0 LUMO(eV) ※3 -4.12E+0～-3.7E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCOC(CCCCCCCCCCCCCCCCCCC)=O)CCCCCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=1.2E+5* (41248 ～ 3.5E+5) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.8E-6 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 1.4E-6 (3.6E-10～ 0.0054) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 1.7E-6 (2.6E-8～ 0.00012) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 8.1E-9 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=8.5E+5* (2.0E+5 ～3.6E+6) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 8.8E-7 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 2.3E-7 (1.8E-11～ 0.0029) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 5.0E-6 (4.0E-8～ 0.00063) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 4.7E-6 (2.6E-8～ 0.00087) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 1.3E-8 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 8.9E-7 (6.6E-10～ 0.0012) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=5.9E-9 (±2.4E-10) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 4.5E-8 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 9.8E-9 (9.8E-12～ 9.9E-6) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 8.7E-7 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.4E-9 (1.9E-12～ 1.0E-6) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

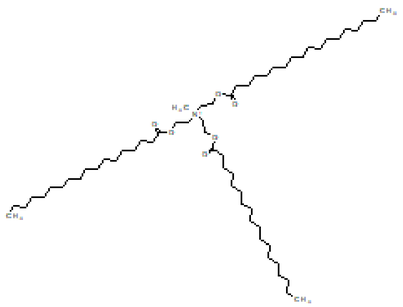
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-12	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウム C16:1(Δ9)脂肪酸ジエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW　637.01 水溶解度(mg/L)　※1　2.1751E-06 logP(Kow Win)　※1　10.93 logBCFmaxtox　※2　1.77E+0 LUMO(eV)　※3　-3.86E+0～-3.45E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCOC(CCCCCCC/C=C¥CCCCCC)=O)CCCCCCC/C=C¥CCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=32.3660* (11.588 ～ 90.397) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.00052 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 0.00023 (2.9E-7～ 0.18) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.00055 (2.3E-5～ 0.013) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 6.0E-6 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=62.8611* (20.718 ～ 190.733) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.00042 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 4.1E-5 (2.4E-8～ 0.068) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.0015 (4.3E-5～ 0.049) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.0014 (3.2E-5～ 0.063) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 2.2E-5 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.00022 (1.4E-6～ 0.034) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=1.6E-5* (1.2E-6 ～ 0.00023) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 4.3E-5 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 2.9E-5 (2.7E-7～ 0.0030) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 0.0002 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 4.9E-06 (4.8E-8～ 0.00050) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

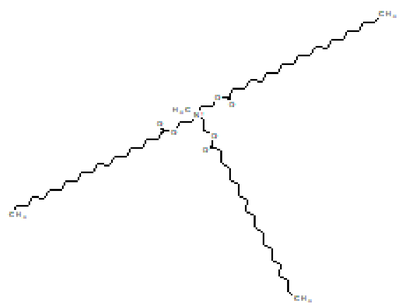
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-13	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウム C18:1(Δ9)脂肪酸ジエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 693.12 水溶解度(mg/L) ※1 1.9412E-08 logP(Kow Win) ※1 12.89 logBCFmaxtox ※2 3.03E-1 LUMO(eV) ※3 -4.02E+0～-3.52E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCOC(CCCCCCC/C=C¥CCCCCCCC)=O)CCCCCCC/C=C¥CCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=1309* (461 ～ 3716) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.00040 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 2.3E-5 (1.5E-8～ 0.037) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 4.1E-5 (1.1E-6～ 0.0015) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 3.1E-7 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=4557* (1357 ～ 15295) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.6E-5 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 4.0E-6 (9.8E-10～ 0.016) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.00011 (1.9E-6～ 0.0068) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.00011 (1.3E-6～ 0.0090) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 7.8E-7 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.9E-5 (4.6E-8～ 0.0075) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=4.6E-7 (±2.6E-8) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.0E-6 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 7.9E-7 (2.7E-9～ 0.00023) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 1.7E-5 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.2E-7 (5.2E-10～ 3.0E-5) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

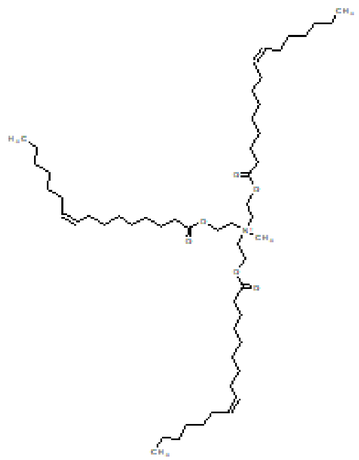
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-14	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウム C18:3(Δ9,12,15)脂肪酸ジエステル メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 685.05 水溶解度(mg/L) ※1 1.1916E-07 logP(Kow Win) ※1 12.03 logBCFmaxtox ※2 9.45E-1 LUMO(eV) ※3 -4.09E+0～-3.66E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCO)CCOC(CCCCCCC/C=C¥C/C=C¥C/C=C¥CC)=O)CCCCCCC/C=C¥C/C=C¥C/C=C¥CC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=250.1242* (88.650 ～ 705.718) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.00013 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 6.5E-5 (5.7E-8～ 0.075) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.00013 (4.3E-6～ 0.0040) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 1.2E-6 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=690* (216 ～ 2208) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 9.0E-5 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 1.1E-5 (4.1E-9～ 0.031) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.00036 (7.7E-6～ 0.017) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.00035 (5.6E-6～ 0.022) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 3.4E-6 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 5.6E-5 (2.1E-7～ 0.015) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=2.3E-6* (±1.4E-7) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 7.8E-6 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 3.9E-6 (2.1E-8～ 0.00073) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 5.2E-5 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 6.4E-7 (3.9E-9～ 0.00010) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

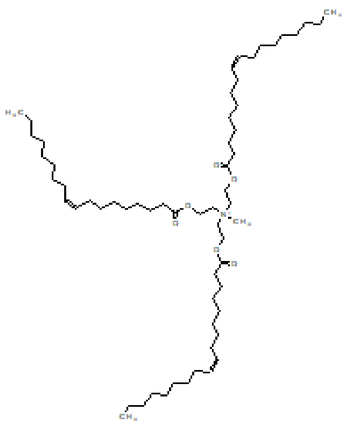
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-15	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC10脂肪酸トリエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 626.97 水溶解度(mg/L) ※1 7.1685E-06 logP(Kow Win) ※1 10.4 logBCFmaxtox ※2 2.16E+0 LUMO(eV) ※3 -3.97E+0～-3.52E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCOC(CCCCCCCCC)=O)CCOC(CCCCCCCCC)=O)CCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=11.2665*(4.036 ～ 31.450) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.0010 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 0.00043 (6.6E-7～ 0.28) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.0011 (5.2E-5～ 0.024) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 1.3E-5 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=19.1676*(6.332 ～ 58.021) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 0.00088 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 7.6E-5 (5.7E-8～ 0.10) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 0.0029 (0.00010～ 0.084) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.0029 (7.6E-5～ 0.11) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 5.4E-5 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.00043 (3.5E-6～ 0.053) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=4.3E-5*(3.3E-6 ～ 0.00056) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 9.9E-5 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 7.6E-5 (9.2E-7～ 0.0062) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 0.00039 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.3E-5 (1.6E-7～ 0.0011) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

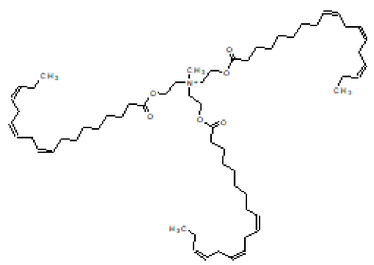
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-16	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC16脂肪酸トリエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 879.45 水溶解度(mg/L) ※1 4.1219E-15 logP(Kow Win) ※1 19.24 logBCFmaxtox ※2 -4.43E+0 LUMO(eV) ※3 -4.03E+0～-3.6E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCOC(CCCCCCCCCCCCCCC)=O)CCOC(CCCCCCCCCCCCCCC)=O)CCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=2.4E+8* (7.6E+7 ～7.7E+8) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.E-8 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 1.4E-8 (7.5E-13～0.00025) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 9.4E-09 (5.0E-11～ 1.7E-6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 2.E-11 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=5.1E+8* (7.4 E+8～ 3.6E+10) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 3.3E-9 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 2.1E-9 (2.3E-14～0.00019) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 3.0E-8 (6.6E-11～1.3E-5) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 2.7E-8 (3.7E-11～1.9E-5) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 1.6E-11 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 6.0E-9 (5.6E-13～6.5E-5) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=4.5E-12 (±9.8E-14) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 9.2E-11 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 7.1E-12 (8.6E-16～ 6.0E-8) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 6.3E-9 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 8.4E-13 (1.8E-16～ 3.9E-9) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-17	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC18脂肪酸トリエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 963.61 水溶解度(mg/L) ※1 3.35E-18 logP(Kow Win) ※1 22.19 logBCFmaxtox ※2 -6.63E+0 LUMO(eV) ※3 -3.84E+0～-3.5E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCOC(CCCCCCCCCCCCCCCCC)=O)CCOC(CCCCCCCCCCCCCCCCC)=O)CCCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=7.2E+10* (2.1E+10 ～2.5E+11) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.1E-10 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 4.3E-10 (7.0E-15～2.6E-5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 1.9E-10 (4.6E-13～ 7.7E-8) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 2.3E-13 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=3.4E+12* (3.2E+11 ～3.6E+13) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 5.E-11 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 6.2E-11 (1.5E-16～2.7E-5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 6.3E-10 (5.3E-13～ 7.4E-7) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 5.6E-10 (2.7E-13～ 1.1E-6) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 1.E-13 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.4E-10 (2.7E-15～ 7.4E-6) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=2.1E-14 (±2.8E-16) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 8.7E-13 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 3.2E-14 (7.8E-19～ 1.3E-9) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 1.6E-10 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 3.3E-15 (1.7E-19～6.4E-11) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-18	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウムC20脂肪酸トリエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 1047.77 水溶解度(mg/L) ※1 2.71E-21 logP(Kow Win) ※1 25.13 logBCFmaxtox ※2 -8.83E+0 LUMO(eV) ※3 -4.02E+0～-3.58E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCOC(CCCCCCCCCCCCCCCCCCC)=O)CCOC(CCCCCCCCCCCCCCCCCCC)=O)CCCCCCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=1.8E+13* (4.8E+12～6.8E+13) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 4.3E-12 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 1.3E-11 (6.3E-17～ 2.8E-6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 3.7E-12 (4.0E-15～ 3.4E-9) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 2.5E-15 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=2.1E+15* (1.0E+11～1.2E+14) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 7.6E-13 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 1.8E-12 (9.0E-19～ 3.7E-6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 1.3E-11 (4.2E-15～ 4.1E-8) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.1E-11 (1.9E-15～ 6.8E-8) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 6.7E-16 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 3.3E-12 (1.3E-17～ 8.6E-7) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=9.5E-17 (±7.5E-19) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.5E-15 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.4E-16 (6.9E-22～2.9E-11) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 3.9E-12 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.3E-17 (1.6E-22～1.0E-12) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

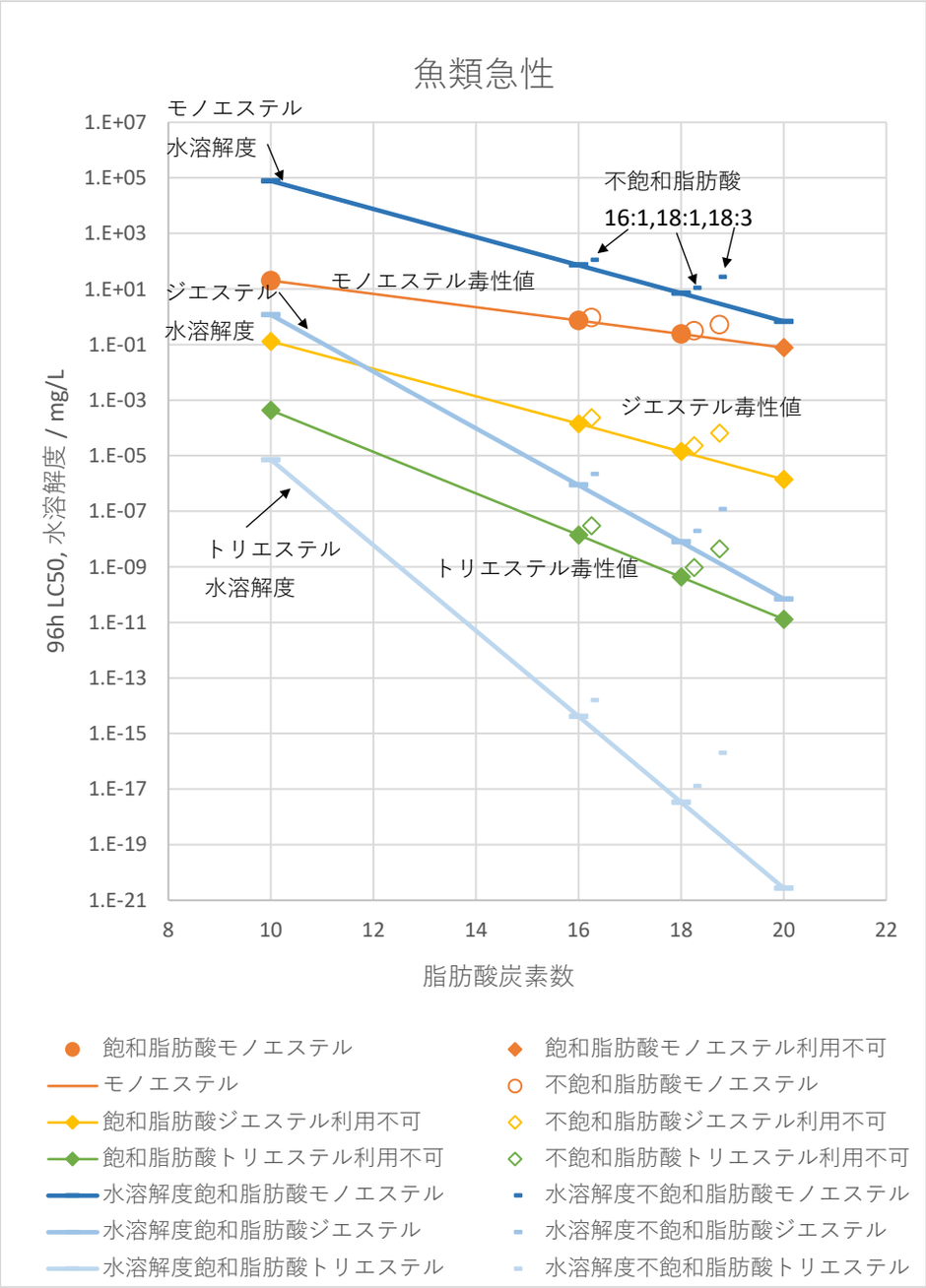
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-19	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウム C16:1(Δ9)脂肪酸トリエステル メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 873.4 水溶解度(mg/L) ※1 1.6105E-14 logP(Kow Win) ※1 18.59 logBCFmaxtox ※2 -3.95E+0 LUMO(eV) ※3 -2.07E+0～-1.54E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCOC(CCCCCCC/C=C¥CCCCCC)=O)CCOC(CCCCCCC/C=C¥CCCCCC)=O)CCCCCCC/C=C¥CCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=1.6E+8* (5.4E+7～4.9E+8) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.4E-8 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 3.0E-8 (2.1E-12～0.00042) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 2.2E-8 (1.4E-10～ 3.5E-6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 5.5E-11 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=2.1E+9* (3.8E+8～1.2E+10) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 8.4E-9 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 4.6E-9 (7.0E-14～0.00031) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 7.0E-8 (1.9E-10～2.5E-5) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 6.4E-8 (1.1E-10～3.7E-5) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 4.8E-11 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.4E-8 (1.8E-12～0.00011) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=1.5E-11 (±3.6E-13) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.6E-10 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 2.4E-11 (4.0E-15～ 1.4E-7) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 1.4E-8 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 2.9E-12 (8.4E-16～ 9.9E-9) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

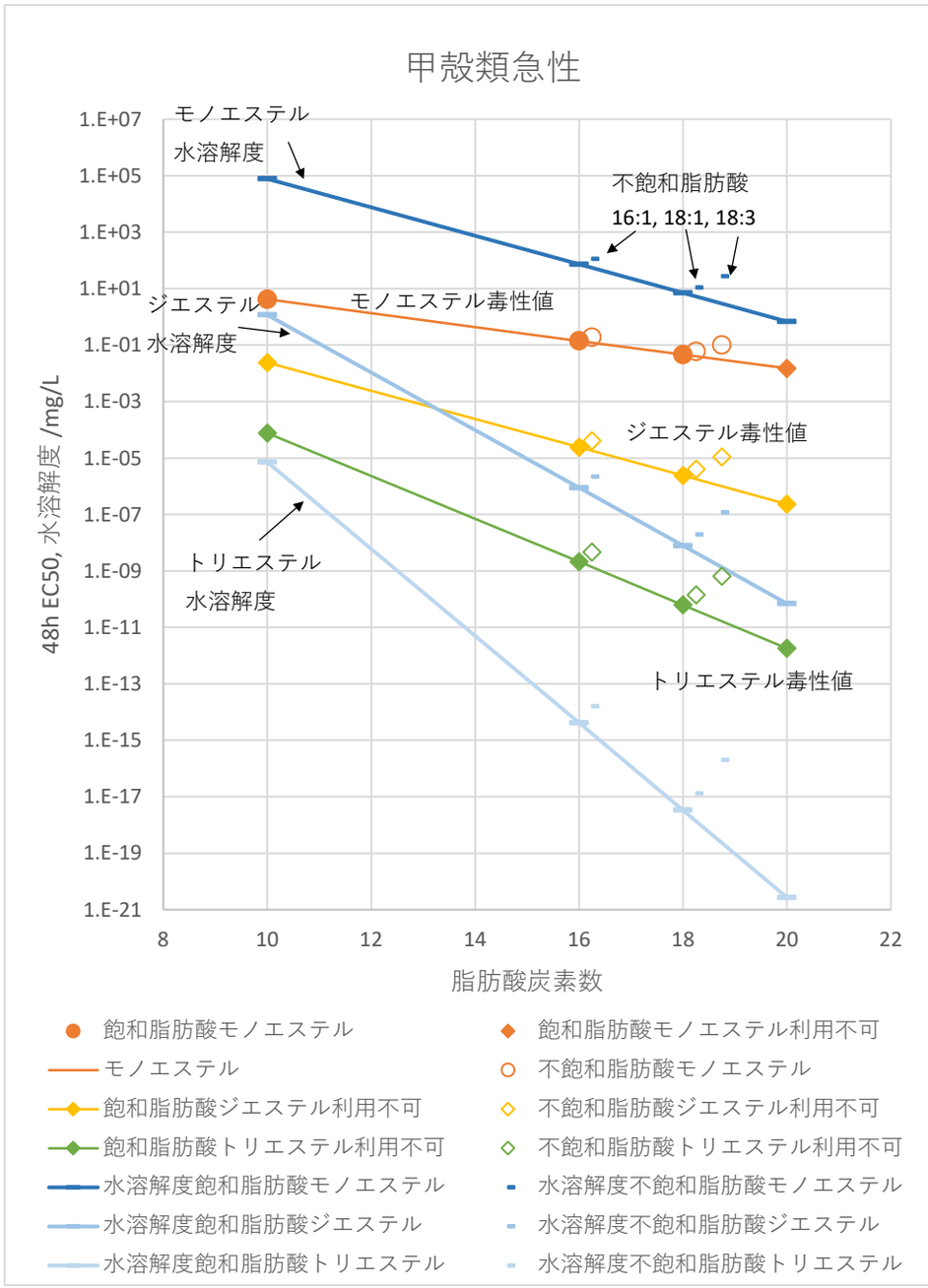
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-20	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウム C18:1(Δ9)脂肪酸トリエステル　メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW　957.56 水溶解度(mg/L)　※1　1.31E-17 logP(Kow Win)　※1　21.54 logBCFmaxtox　※2　-6.15E+0 LUMO(eV)　※3　-3.95E+0～-3.58E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCOC(CCCCCCC/C=C¥CCCCCCCC)=O)CCOC(CCCCCCC/C=C¥CCCCCCCC)=O)CCCCCCC/C=C¥CCCCCCCC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=2.0E+10* (6.1E+9～6.9E+10) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 5.0E-10 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 9.3E-10 (2.0E-14～4.4E-5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 4.5E-10 (1.3E-12～ 1.5E-7) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 6.2E-13 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=8.2E+11* (8.5E+10～8.0E+12) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.3E-10 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 1.4E-10 (4.5E-16～4.1E-5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 1.5E-09 (1.6E-12～ 1.4E-6) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.3E-09 (8.1E-13～ 2.2E-6) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 3.2E-13 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 3.3E-10 (8.9E-15～1.2E-5) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=6.8E-14 (±1E-15) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.4E-12 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.1E-13 (3.6E-18～ 3.1E-9) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 3.6E-10 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.1E-14 (8.0E-19～1.6E-10) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
1-21	[2ーヒドロキシーN, Nービス(2ーヒドロキシエチル)ーNーメチルエタンー1ーアミニウム C18:3(Δ9,12,15)脂肪酸トリエステル メチルスルファート 備考: 界面活性剤。カチオン部分のみ予測。 MW 945.47 水溶解度(mg/L) ※1 2.00E-16 logP(Kow Win) ※1 20.25 logBCFmaxtox ※2 -5.19E+0 LUMO(eV) ※3 -3.9E+0～-3.47E+0  O=C(OCC[N+](C)(CCOC(CCCCCCC/C=C¥C/C=C¥C/C=C¥CC)=O)CCOC(CCCCCCC/C=C¥C/C=C¥C/C=C¥CC)=O)CCCCCCC/C=C¥C/C=C¥C/C=C¥CC	魚類	急性	1.91	**使用不可** reactive unspecified <=1.8E+9* (5.7E+8～5.9E+9) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.8E-9 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 4.4E-9 (1.6E-13～0.00012) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 2.5E-9 (1.0E-11～ 6.2E-7) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 4.5E-12 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.53	**使用不可** reactive unspecified <=5.1E+10* (6.4E+9～4.1E+11) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 8.2E-10 ※logP>5.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** n+, N+ 6.5E-10 (4.2E-15～ 0.00010) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) COS_X ester unreactive 8.2E-9 (1.3E-11～ 5.1E-6) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNO_X ester unreactive (Daphnid) 7.4E-9 (7.2E-12～ 7.7E-6) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 2.9E-12 ※logP>6.4, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 1.7E-9 (9.4E-14～3.2E-5) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	1.52	**使用不可** reactive unspecified <=7.4E-13 (±1.4E-14) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 1.9E-11 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.2E-12 (8.1E-17～ 1.7E-8) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	0.5		**使用可** Esters 1.9E-9 ※logP>8.0, 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ester unreactive (Alga) 1.3E-13 (1.7E-17～ 1.0E-9) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

No.1 [２－ヒドロキシ－N，N－ビス（２－ヒドロキシエチル）－N－メチルエタン－１－アミニウムと飽和脂肪酸（C＝１０～２０、直鎖型）又は不飽和脂肪酸（C＝１６～１８、直鎖型）とのエステル化反応生成物]の塩(カチオン部分) KATE結果

*魚類慢性・甲殻類慢性・藻類は利用不可





No.2を構成する物質および組成

No.	CAS RN	名称	炭素鎖										EO鎖A	EO鎖B
			8	10	12	14	16	18	20	18:1（Δ9）	18:2（Δ9, 12）	18:3（Δ9, 12, 15）		
2		N，NージポリオキシエチレンーNーアルキル（C8～18、直鎖型）アミン（数平均分子量が1,000未満のものに限る。）												
2a	31017-83-1	Poly(oxy-1,2-ethanediyl), α,α'-[(dodecylimino)di-2,1-ethanediyl]bis(ω-hydroxy)-			○								x	y
2b	68155-33-9	アルキル（C＝14～18）アミンのエトキシ化物				○	○	○					x	y
2c	71786-60-2	2，2'ー（アルキル（C＝12～18）イミノ）ジエタノール			○	○	○	○					1	1
2d	61791-14-8	ココーアルキルアミンのエトキシ化物	○	○	◎	○	○	○	△	○	○		x	y
2e	26635-92-7	α，α'ー[（オクタデシルイミノ）ジエチレン]ビス[ωーヒドロキシポリ（オキシエチレン）]						○					x	y
2f	61790-82-7	水素化獣脂アルキルアミンのエトキシ化物				○	○	◎					x	y
2g	31727-16-9	Poly(oxy-1,2-ethanediyl), α,α'-[(octylimino)di-2,1-ethanediyl]bis[ω-hydroxy-	○										x	y

凡例 ○：成分として含まれるもの
◎：成分として最も多く含まれるもの
△：成分として含まれるもの(1%未満)

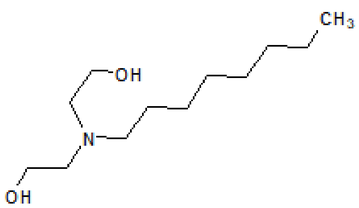
出典：油脂検査協会(2021)食用油脂の脂肪酸組成 http://www.oil-kensa.or.jp/pdf/2021F.pdf

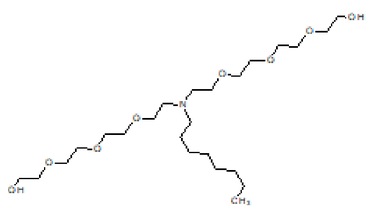
カネダ株式会社 油脂の脂肪酸組成表 https://www.kaneda.co.jp/jigyou/oils_composition.html

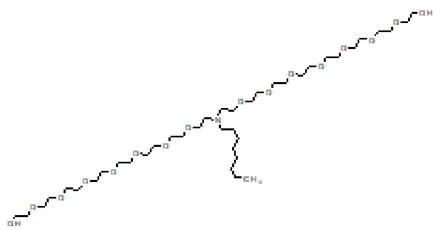
石けん百貨株式会社 主な脂肪酸組成表 https://www.live-science.com/honkan/soap/soapchemistry03.html

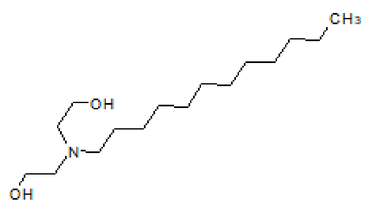
Acme-Hardesty Hydrogenated Talolow Fatty Acid(HTFA) https://www.acme-hardesty.com/product/hydrogenated-tallow-fatty-acid-htfa/

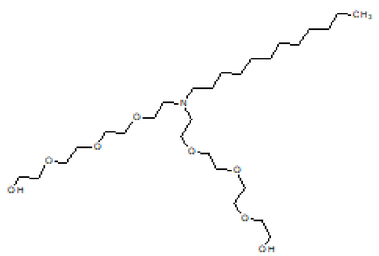
・ の炭素鎖についてEO鎖A,Bの組み合わせが(1,1)(4,4)(8,8)の物質についてQSAR予測を行った
・ の炭素鎖についてEO鎖A,Bの組み合わせが(1,1)の物質についてQSAR予測を行った

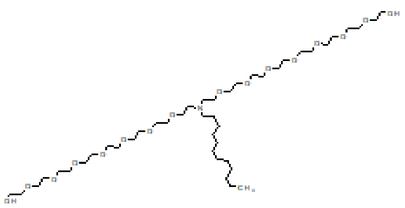
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2	N, NージポリオキシエチレンーNーアルキル（C8～18、直鎖型）アミン（数平均分子量が1,000未満のものに限る。） 単位検討物質 CAS RN **31017-83-1、68155-33-9、71786-60-2、61791-14-8、26635-92-7、61790-82-7、31727-16-9**						
2-1	N, NージポリオキシエチレンーNーC8アミン 備考： 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(1,1) MW 217.35 水溶解度(mg/L) ※1 8055.28 logP(Kow Win) ※1 1.9353 logBCFmaxtox ※2 1.44 LUMO(eV) ※3 2.38～2.67  CCCCCCCCN(CCO)(CCO)	魚類	急性	0.28	**使用可** Narcotic amines 60.4149 (18.906 ～ 193.062)	**使用可** Aliphatic Amines 46.04	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 120 (20～ 650)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 2.74	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=283 (107 ～ 750) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 5.45	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.44	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 1.5 (0.087 ～ 26)
		藻類	急性	0.107	**使用可** Narcotic Amines 21.5 (2.96 ～ 156)	**使用可** Aliphatic Amines 4.56	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 1.51	**使用可** ○ CN_X amine unreactive NH, N< 2.0 (0.035 ～ 110) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 4.9 (0.29 ～ 83)

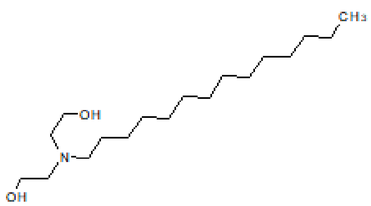
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-2	N, NージポリオキシエチレンーNーC8アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(4,4) MW 481.68 水溶解度(mg/L) ※1 5412.92 logP(Kow Win) ※1 0.2889 logBCFmaxtox ※2 2.16E-1 LUMO(eV) ※3 1.87～2.39  CCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 1635 (512 ～ 5218) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 1231.54	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 1800 (320～ 10000)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 131.49	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=19206 (7038 ～ 52405) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 120.32	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 8.15	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 30 (1.5～ 580)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** Narcotic Amines 173 (24.2 ～ 1240) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 147.16	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 42.32	**使用可** ○ CN_X amine unreactive NH, N< 78 (1.2～ 5000) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 120 (6.5～ 2400)

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-3	N, NージポリオキシエチレンーNーC8アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(8,8) MW 834.11 水溶解度(mg/L) ※1 1909.48 logP(Kow Win) ※1 -1.9063 logBCFmaxtox ※2 -1.42 LUMO(eV) ※3 1.72～2.00  CCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 79638 (24365 ～2.6E+5) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 59041.68 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 42000 (7000～ 2.6E+5) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 13722.65	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=3.7E+6* (1.1E+6～1.2E+7) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 4468.8 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 236.04 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 930 (32～ 27000) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** Narcotic Amines 1680 (181 ～ 15600) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 9055.86 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 2166.91 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 6500 (64～ 650000) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 5400 (140～ 210000) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

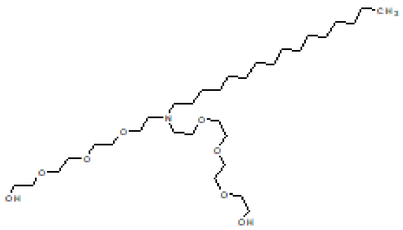
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-4	N, NージポリオキシエチレンーNーC12アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(1,1) MW 273.46 水溶解度(mg/L) ※1 83.127 logP(Kow Win) ※1 3.8879 logBCFmaxtox ※2 2.91 LUMO(eV) ※3 2.36～2.67  CCCCCCCCCCCCN(CCO)(CCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 3.8471 (1.176 ～ 12.584) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 2.97	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 14 (2.3～ 89)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.088	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=5.1240 (1.797 ～ 14.611) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.441	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.045	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.14 (0.0077～ 2.7)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=3.24 (0.38 ～ 27.9) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.235	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.092	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.079 (0.0013～ 4.8)

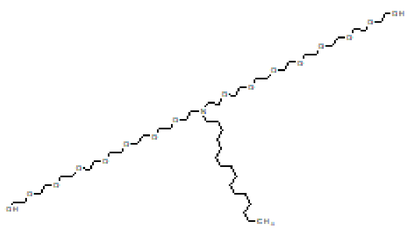
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-5	N, NージポリオキシエチレンーNーC12アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(4,4) MW 537.78 水溶解度(mg/L) ※1 49.57 logP(Kow Win) ※1 2.2533 logBCFmaxtox ※2 1.68 LUMO(eV) ※3 1.85～2.29  CCCCCCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 92.1885 (28.785 ～ 295.245) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 70.42 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 200 (34～ 1100) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 3.75	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=307 (115 ～ 812) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 8.65	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.731	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 2.5 (0.14～ 43)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=135 (15.7 ～ 1170) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 3.75	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 2.28	**使用可** ○ CN_X amine unreactive NH, N< 2.8 (0.050～ 150) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 7.7 (0.44～ 130)

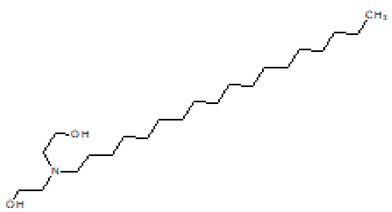
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-6	N, NージポリオキシエチレンーNーC12アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(8,8) MW 水溶解度(mg/L) ※1 16.72 logP(Kow Win) ※1 0.06 logBCFmaxtox ※2 4.33E-2 LUMO(eV) ※3 1.70～2.02  CCCCCCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 4292 (1343 ～ 13712) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**予測せず**	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 4400 (790～ 24000) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**予測せず**	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=55915 (20231 ～ 1.5E+6) 判定不能(minimum toxicity)	**予測せず**	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**予測せず**	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 74 (3.7～ 1500) 水溶解度超
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=13200 (1400 ～ 1.2E+5) 判定不能(minimum toxicity)	**予測せず**	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**予測せず**	**使用可** ○ CN_X amine unreactive NH, N< 220 (3.3～ 14000) 水溶解度超 CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 320 (16～ 6500) 水溶解度超

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-7	N, NージポリオキシエチレンーNーC14アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(1,1) MW 301.52 水溶解度(mg/L) ※1 8.3009 logP(Kow Win) ※1 4.8819 logBCFmaxtox ※2 3.63 LUMO(eV) ※3 2.37～2.66  CCCCCCCCCCCCCCN(CCO)(CCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 0.9724 (0.291 ～ 3.244) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 0.740	**使用不可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 4.8 (0.71～ 33) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.016	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.6982 (0.228 ～ 2.143) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.123	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.014	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.043 (0.0020～ 0.93) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=0.58 (0.066 ～ 5.06) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.052	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.022	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.015 (0.00022～ 1.1) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.090 (0.0025～ 3.2) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

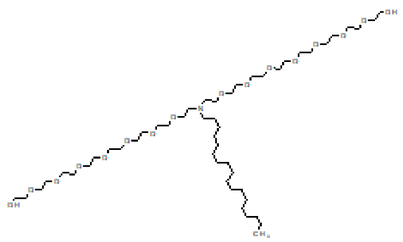
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-8	N, NージポリオキシエチレンーNーC16アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(1,1) MW 329.57 水溶解度(mg/L) ※1 0.82173 logP(Kow Win) ※1 5.8641 logBCFmaxtox ※2 4.28 LUMO(eV) ※3 2.42～3.00 CCCCCCCCCCCCCCCCN(CCO)(CCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 0.2854 (0.084 ～ 0.973) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.183 ※logP>5.0	**使用不可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 1.6 ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.0027	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.1195 (0.036 ～ 0.399) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.034 ※logP>5.0	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.0044	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.013 (0.00050～ 0.33) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=0.1 (0.011 ～ 0.93) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.012	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.0053	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.0029 (3.4E-5～ 0.25) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.023 (0.00041～ 1.3) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

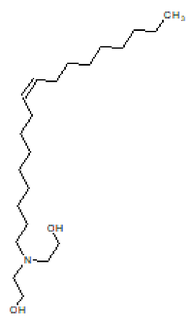
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-9	N, NージポリオキシエチレンーNーC16アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(4,4) MW 593.89 水溶解度(mg/L) ※1 0.449 logP(Kow Win) ※1 4.2177 logBCFmaxtox ※2 3.14 LUMO(eV) ※3 1.92～2.39  CCCCCCCCCCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 5.1656 (1.570 ～ 16.996) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 3.98 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 21 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.106	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=5.0027 (1.734 ～ 14.433) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.614 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.065	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.20 (0.010～ 4.0)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=3.9 (0.45 ～ 33.7) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.304	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.122	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.096 (0.0015～ 6.1)

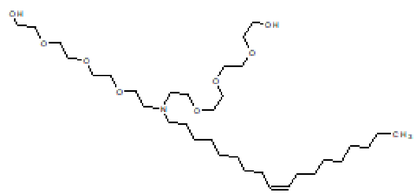
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-10	N, NージポリオキシエチレンーNーC16アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(8,8) MW 946.32 水溶解度(mg/L) ※1 0.14575 logP(Kow Win) ※1 2.0225 logBCFmaxtox ※2 1.51 LUMO(eV) ※3 1.73～2.06  CCCCCCCCCCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 230.3854 (72.056 ～ 736.618) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 175.69 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 450 (80～ 2600) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 10.15 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=862 (326 ～ 2274) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 21.0 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 1.73 水溶解度超で影響なし	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 5.9 (0.34～ 100) 水溶解度超
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=366 (42.1 ～ 3180) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 17.24 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 5.73 水溶解度超で影響なし	**使用可** ○ CN_X amine unreactive NH, N< 7.3 (0.13～ 400) 水溶解度超 CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 19 (1.1～ 320) 水溶解度超

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-11	N, NージポリオキシエチレンーNーC18アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(1,1) MW 357.63 水溶解度(mg/L) ※1 0.080756 logP(Kow Win) ※1 6.8463 logBCFmaxtox ※2 4.50 LUMO(eV) ※3 2.42～2.71  CCCCCCCCCCCCCCCCCCN(CCO)(CCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 0.1983 (0.058 ～ 0.682) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.045 ※logP>5.0	**使用不可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.55 (0.066～ 4.7) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.00047	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.0689 (0.020 ～ 0.237) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.0094 ※logP>5.0	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.0013	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.0038 (0.00012～ 0.12) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=0.018 (0.0019 ～ 0.17) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.0025 ※logP>6.4	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.0013	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.00057 (5.1E-6～ 0.063) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.0059 (6.4E-5～ 0.54) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

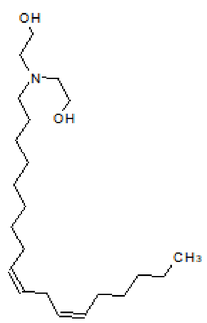
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-12	N, NージポリオキシエチレンーNーC18アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(4,4) MW 621.95 水溶解度(mg/L) ※1 0.042585 logP(Kow Win) ※1 5.1999 logBCFmaxtox ※2 3.86 LUMO(eV) ※3 1.82～2.28 CCCCCCCCCCCCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 1.2667 (0.377 ～ 4.257) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.944 ※logP>5.0	**使用不可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 6.8 (0.97～ 48) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.018	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.6497 (0.209 ～ 2.019) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.163 ※logP>5.0	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.019	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.058 (0.0026～ 1.3) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=0.66 (0.074 ～ 5.85) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.065 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.028	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.018 (0.00024～ 1.3) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.12 (0.0028～ 4.8) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

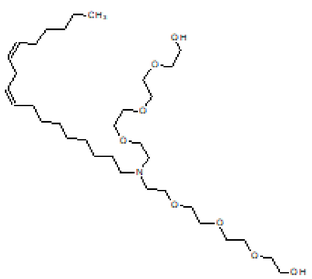
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-13	N, NージポリオキシエチレンーNーC18アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(8,8) MW 974.38 水溶解度(mg/L) ※1 0.013591 logP(Kow Win) ※1 3.0047 logBCFmaxtox ※2 2.24 LUMO(eV) ※3 1.72～2.00  CCCCCCCCCCCCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 53.3193 (16.522 ～ 172.070) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 40.94 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 140 (25～ 860) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 1.67 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=106.2810 (39.423 ～ 286.521) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 5.48 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.505 水溶解度超で影響なし	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 1.7 (0.094～ 29) 水溶解度超
		藻類	急性	0.107	**使用不可** reactive unspecified <=60.8 (7.1 ～ 522) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 3.59 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 1.3 水溶解度超で影響なし	**使用可** ○ CN_X amine unreactive NH, N< 1.3 (0.024～ 75) 水溶解度超 CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 4.6 (0.24～ 90) 水溶解度超

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-14	N, NージポリオキシエチレンーNーC18:1 (Δ9)アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(1,1) MW 355.61 水溶解度(mg/L) ※1 0.12677 logP(Kow Win) ※1 6.6313 logBCFmaxtox ※2 4.51 LUMO(eV) ※3 1.11～1.37  CCCCCCCC¥C=C/CCCCCCCCN(CCO)(CCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 0.1907 (0.055 ～ 0.656) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.062 ※logP>5.0	**使用不可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.71 ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.00070	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.0462 (0.014 ～ 0.154) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.013 ※logP>5.0	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.0018	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.0050 (0.00017～ 0.15) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** Narcotic Amines 0.88* (0.05 ～ 15.7) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.0036 ※logP>6.4	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.0018	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.00082 (7.9E-6～ 0.086) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.0080 (9.8E-5～ 0.66) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-15	N, NージポリオキシエチレンーNーC18:1 (Δ9)アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(4,4) MW 619.93 水溶解度(mg/L) ※1 0.06701 logP(Kow Win) ※1 4.9849 logBCFmaxtox ※2 3.70 LUMO(eV) ※3 1.11～1.38  CCCCCCCC¥C=C/CCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 1.7197 (0.514 ～ 5.751) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 1.30 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 8.8 ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.026	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.8332 (0.277 ～ 2.508) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.220 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.025	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.077 (0.0035～ 1.7) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** Narcotic Amines 5.6 (0.48 ～ 65.5) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 0.091 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.039	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.026 (0.00037～ 1.9) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.16 (0.0042～ 5.9) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-16	N, NージポリオキシエチレンーNーC18:1 (Δ9)アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(8,8) MW 972.36 水溶解度(mg/L) ※1 0.021411 logP(Kow Win) ※1 2.7897 logBCFmaxtox ※2 2.08 LUMO(eV) ※3 1.21～1.34 CCCCCCCC¥C=C/CCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCOCCO CCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 73.7668 (22.916 ～ 237.455) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 56.56 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 190 (32～ 1100) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 2.49 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=147.4788 (55.266 ～ 393.552) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 7.39 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.664 水溶解度超で影響なし	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 2.2 (0.13～ 38) 水溶解度超
		藻類	急性	0.107	**使用不可** Narcotic Amines 49.2 (6.24 ～ 388) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 5.08 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 1.80 水溶解度超で影響なし	**使用可** ○ CN_X amine unreactive NH, N< 1.9 (0.035～ 110) 水溶解度超 CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 6.3 (0.34～ 120) 水溶解度超

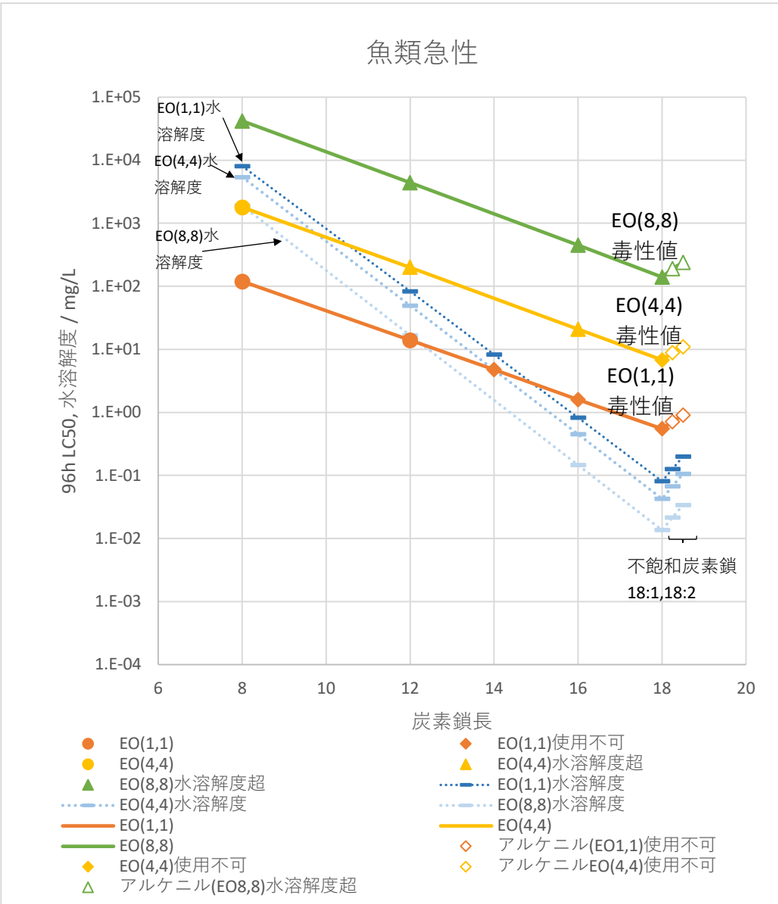
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-17	N, NージポリオキシエチレンーNーC18:2 (Δ9,12)アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(1,1) MW 353.59 水溶解度(mg/L) ※1 0.19899 logP(Kow Win) ※1 6.4163 logBCFmaxtox ※2 4.49 LUMO(eV) ※3 1.10～1.28  CCCCC/C=C¥C/C=C¥CCCCCCCCN(CCO)(CCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 0.1987 (0.058 ～ 0.683) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.085 ※logP>5.0	**使用不可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.91 (0.11～ 7.3) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.0010	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.0490 (0.015 ～ 0.162) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.017 ※logP>5.0	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.0023	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.0066 (0.00023～ 0.19) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** Narcotic Amines 1.04 (0.062 ～ 17.4) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用不可** Aliphatic Amines 0.0051 ※logP>6.4	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.0024	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.0012 (1.2E-5～ 0.12) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.011 (0.00015～ 0.81) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

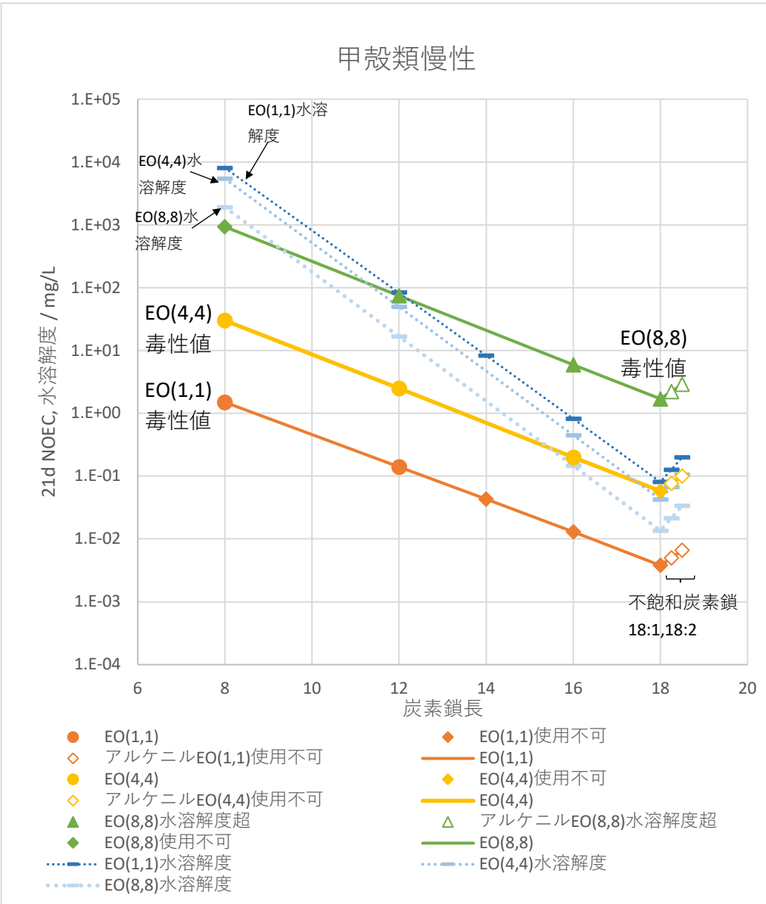
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-18	N, NージポリオキシエチレンーNーC18:2 (Δ9,12)アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(4,4) MW 617.92 水溶解度(mg/L) ※1 0.10544 logP(Kow Win) ※1 4.7699 logBCFmaxtox ※2 3.55 LUMO(eV) ※3 1.08～1.33  CCCCC/C=C¥C/C=C¥CCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 2.3508 (0.706 ～ 7.824) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 1.80 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 11 (1.7～ 76) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 0.039	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=1.2908 (0.436 ～ 3.820) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 0.296 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.033	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.10 (0.0048～ 2.2) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	0.107	**使用不可** Narcotic Amines 6.61 (0.59 ～ 73.6) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 0.129 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 0.054	**使用不可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.038 (0.00055～ 2.6) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 0.22 (0.0063～ 7.4) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

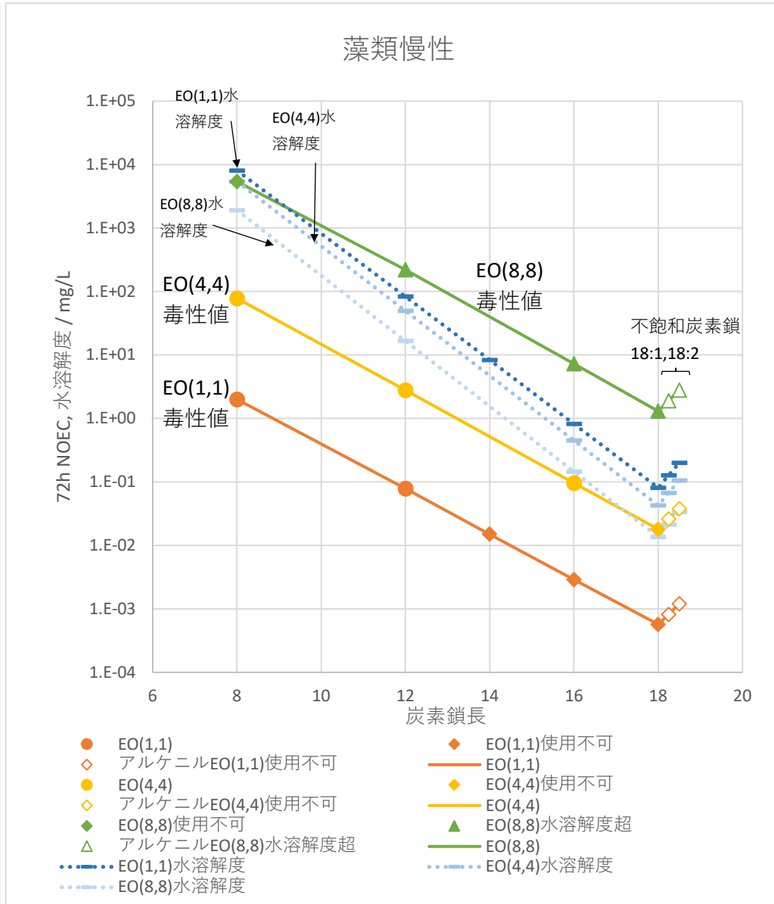
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
2-19	N, NージポリオキシエチレンーNーC18:2 (Δ9,12)アミン 備考: 界面活性剤。 (EO鎖A,EO鎖B):(8,8) MW 970.34 水溶解度(mg/L) ※1 0.033731 logP(Kow Win) ※1 2.5747 logBCFmaxtox ※2 1.92 LUMO(eV) ※3 1.08～1.24 CCCCC/C=C¥C/C=C¥CCCCCCCCN(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)(CCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)	魚類	急性	0.28	**使用不可** Narcotic amines 102.06 (31.777 ～ 327.791) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 78.14 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 240 (42～ 1400) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 3.71	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=225.9920 (85.116 ～ 600.035) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 9.96 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.1		**使用可** Aliphatic Amines 0.873	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 2.9 (0.17～ 51) 水溶解度超
		藻類	急性	0.107	**使用不可** Narcotic Amines 58.1 (7.55 ～ 446) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 7.20 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00916		**使用可** Aliphatic Amines 2.51	**使用可** ○ CN_X amine unreactive NH, N< 2.8 (0.051～ 160) 水溶解度超 CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic 8.6 (0.48～ 160) 水溶解度超

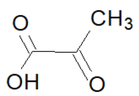
No.2 N，NージポリオキシエチレンーNーアルキル（C8～18、直鎖型）アミン（数平均分子量が1,000未満のものに限る。）
KATE結果

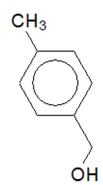
*魚類慢性・甲殻類急性・藻類急性は使用不可



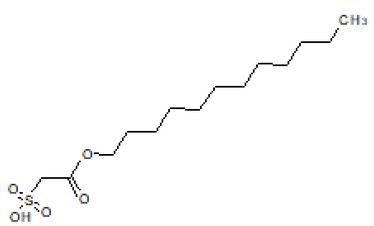


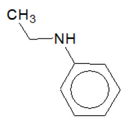


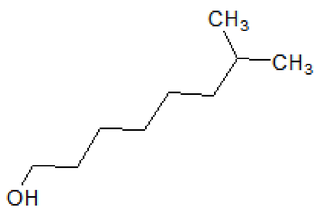
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
3	ナトリウム＝２－オキソプロパノアート CAS RN **113-24-6** 備考:ピルビン酸として予測 MW 88.063 水溶解度(mg/L) ※1 1.0E+6 logP(Kow Win) ※1 -1.2432 logBCFmaxtox ※2 -9.27E-01 LUMO(eV) ※3 -3.03E-1～-2.93E-2  OC(=O)C(=O)C	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=17459.0215 (6305 ～ 48343) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Neutral Organics 59171.71	**使用不可** No applicable results
			慢性			**使用可** Neutral Organics 4062.66	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	>100	**使用不可** reactive unspecified <=54136.5820 (16924 ～ 1.7E+5) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Neutral Organics 24903.57	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 1055.41	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	>3.02	**使用不可** reactive unspecified <=14600 (1430 ～ 1.5E+5) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Neutral Organics 5378.23	**使用不可** No applicable results
			慢性	1.9		**使用可** Neutral Organics 722.97	**使用不可** No applicable results

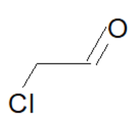
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
4	4ートリルメタノール CAS RN **589-18-4** 備考: MW 122.17 水溶解度(mg/L) ※1 7710 logP(Kow Win) ※1 1.58 logBCFmaxtox ※2 1.21 LUMO(eV) ※3 4.09E-1～4.53E-1  OCc(ccc(c1)C)c1	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 151.7339 (56.065 ～ 410.648)	**使用可** Benzyl Alcohols 86.81	**使用可** CO_X alcohol unreactive Fish 480 (59～ 3800) ○ narcotic group (Fish acute) 290 (43～ 1900)
			慢性	実測データなし		**使用不可** Benzyl Alcohols 7.03 ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用可** narcotic group (Fish chronic) 4.6 (0.28～ 74)
		甲殻類	急性	>100	**使用不可** Baseline narcotics 186.1627 (69.868 ～ 496.027) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Benzyl Alcohols 66.64	**使用可** CO_X alcohol unreactive 130 (3.3～ 4900) CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 120 (7.6～ 1800) ○ narcotic group (Daphnid acute) 49 (7.1～ 340)
			慢性	実測データなし		**使用不可** Benzyl Alcohols 9.98 ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用可** CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 7.0 (0.33～ 150)
		藻類	急性	>100	**使用不可** Baseline narcotics 99.2 (11.3 ～ 872) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Benzyl Alcohols 24.78	**使用可** ○ CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 290 (10～ 7900) narcotic group (Alga acute) 300 (33～ 2800)
			慢性	22		**使用可** Benzyl Alcohols 11.2	**使用可** CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 42 (0.95～ 1800)

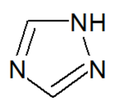
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
5	ポリ(オキシメチレン) CAS RN **30525-89-4** 備考:重合度8の物質について予測 MW 258.22 水溶解度(mg/L) ※1 1000000 logP(Kow Win) ※1 -4.03 logBCFmaxtox ※2 -3.E+0 LUMO(eV) ※3 2.12E+0 ～2.56E+0 HO(CH2O)nH ococococococococo	魚類	急性	39.8	**使用不可** reactive unspecified <=2.6E+7* (9.2E+6～7.5E+7) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Neutral Organics 5.5E+7 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ether unreactive 3.2E+7 (1.7E+6～ 6.1E+8) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol unreactive Fish 1.3E+8 (1.1E+7～ 1.6E+9) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) narcotic group (Fish acute) 6.4E+7 (8.1E+6～ 5.1E+8) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 2.8E+6 水溶解度超で影響なし	**使用不可** narcotic group (Fish chronic) 1.0E+5 (640～ 1.6E+7) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=1.2E+8* (3.1E+7～4.9E+8) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Neutral Organics 1.8E+7 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ether unreactive 4.1E+7 (210000～ 8.1E+9) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol unreactive 9.5E+6 (24000～ 3.8E+9) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 3.2E+6 (44000～ 2.3E+8) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) narcotic group (Daphnid acute) 9.4E+5 (81000～ 1.1E+7) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 3.7E+5	**使用不可** CO_X ether unreactive 8.5E+6 (17000～ 4.2E+9) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 24000 (440～ 1.3E+6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=7.5E+6* (5.7E+6 ～ 1.0E+8) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Neutral Organics 1.3E+6 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 2.2E+7 (450000～ 1.1E+9) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 2.5E+9 (2.3E+6～ 2.7E+12) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) narcotic group (Alga acute) 1.9E+8 (6.1E+6～ 6.2E+9) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 101167.8	**使用不可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 1.7E+5 (5900～ 5.2E+6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 9.9E+7 (1.6E+5～ 6.3E+10) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

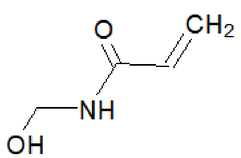
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
6	ナトリウム＝[(ドデシルオキシ)カルボニル]メタンスルホナート CAS RN **1847-58-1** 備考: 酸として予測 MW 308.43 水溶解度(mg/L) ※1 0.075885 logP(Kow Win) ※1 4.81 logBCFmaxtox ※2 3.58E+0 LUMO(eV) ※3 -1.32E+0～-9.E-1  CCCCCCCCCCCCOC(=O)CS(O)(=O)=O	魚類	急性	4.2	**使用不可** reactive unspecified <=0.4808 (0.176 ～ 1.312) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 9.41 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNOS_X acid general 8.7 (0.54～ 140) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.392 水溶解度超で影響なし	**使用不可** QSAR式なし
		甲殻類	急性	5.9	**使用不可** reactive unspecified <=0.3140 (0.107 ～ 0.926) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 14.48 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 4.41 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	6.8	**使用不可** reactive unspecified <=0.67 (0.077 ～ 5.9) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 3.95 水溶解度超で影響なし	**使用不可** QSAR式なし
			慢性	0.86		**使用可** Esters 2.52 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results

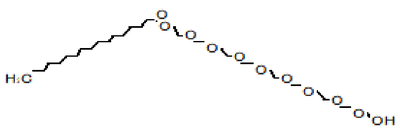
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
7	Nーエチルアニリン CAS RN **103-69-5** 備考: MW 121.18 水溶解度(mg/L) ※1 2410 logP(Kow Win) ※1 2.11 logBCFmaxtox ※2 1.58 LUMO(eV) ※3 4.17E-1～7.06E-1  N(c(cccc1)c1)CC	魚類	急性	80.4	**使用可** Baseline narcotics 60.0941 (22.227 ～ 162.474)	**使用可** Neutral Organics 71.51	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< aromatic 53 (8.2～ 350) ○ CNOS_X amine sec, aliphatic or aromatic w/o n 29 (4.2～ 200)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 7.11	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	4.34	**使用不可** Baseline narcotics 64.0307 (24.130 ～ 169.913) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 41.21	**使用可** ○ CN_X amine unreactive NH, N< aromatic 4.3 (1.6～ 11) CNOS_X amine sec, aliphatic or aromatic w/o n S(Daphnid) 5.6 (0.26～ 120)
			慢性	0.54		**使用可** Neutral Organics 4.19	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.67 (0.039～ 12)
		藻類	急性	33.2	**使用可** Baseline narcotics 39.5 (4.55 ～ 343)	**使用可** Neutral Organics 32.63	**使用不可** No applicable results
			慢性	3.55		**使用可** Neutral Organics 8.83	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 0.80 (0.014～ 44)

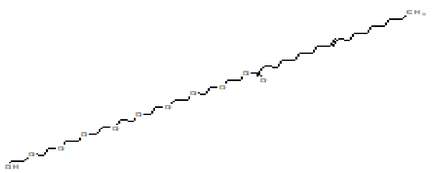
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
8	7ーメチルオクタンー1ーオール CAS RN **27458-94-2** 備考: MW 144.26 水溶解度(mg/L) ※1 461 logP(Kow Win) ※1 3.223 logBCFmaxtox ※2 2.40E+0 LUMO(eV) ※3 3.34E+0～3.55E+0  CC(C)CCCCCCO	魚類	急性	11	**使用可** Baseline narcotics 30.5713 (11.181 ～ 83.587)	**使用可** Neutral Organics 9.45	**使用可** primary alcohol SCAS 15 (1.5 ～ 160) CO_X alcohol unreactive Fish 18 (2.2 ～ 140) ○ narcotic group (Fish acute) 12 (1.7 ～ 76)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 1.06	**使用可** narcotic group (Fish chronic) 0.36 (0.030 ～ 4.2)
		甲殻類	急性	9	**使用可** Baseline narcotics 15.0095 (5.340 ～ 42.185)	**使用可** Neutral Organics 6.01	**使用可** CO_X alcohol unreactive 7.0 (0.23 ～ 210) CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 8.7 (0.63 ～ 120) ○ narcotic group (Daphnid acute) 4.1 (0.61 ～ 27)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.8	**使用可** CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 0.95 (0.044 ～ 21)
		藻類	急性	11	**使用可** Baseline narcotics 6.01 (0.7 ～ 51.5)	**使用可** Neutral Organics 7.14 水溶解度超で影響なし	**使用可** primary alcohol SCAS 4.9 (0.23 ～ 100) ○ CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 3.9 (0.20 ～ 77) narcotic group (Alga acute) 8.8 (1.1 ～ 72)
			慢性	3.4		**使用可** Neutral Organics 2.4	**使用可** CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 0.83 (0.021 ～ 33)

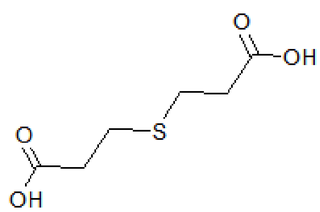
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
9	クロロアセトアルデヒド CAS RN **107-20-0** 備考: MW 78.5 水溶解度(mg/L) ※1 180634.31 logP(Kow Win) ※1 0.0881 logBCFmaxtox ※2 6.57E-2 LUMO(eV) ※3 4.18E-1～4.81E-1  O=CCCl	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=1738 (637～4737) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aldehydes (Mono) 39.15	**使用可** CNO_X aldehyde aliphatic general 25 (4.2～ 150) ※f: 判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aldehydes (Mono) 14.38	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=3294 (1166 ～ 93038) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aldehydes (Mono) 42.86	**使用可** CNO_X aldehyde normal 32 (1.8～ 570) ※f: 判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
			慢性	2.5		**使用可** Aldehydes (Mono) 0.33	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=1100 (117 ～ 10300) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aldehydes (Mono) 20.37	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用可** Aldehydes (Mono) 5.92	**使用不可** No applicable results

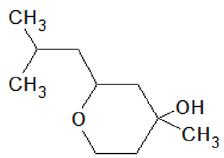
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
10	1，2，4ートリアゾール CAS RN **288-88-0** **MITI 5-5776** 備考： MW 69.066 水溶解度(mg/L) ※1 99586 logP(Kow Win) ※1 -0.58 logBCFmaxtox ※2 -5.68E-1 LUMO(eV) ※3 5.41E-1～5.41E-1  C1 = NC = NN1	魚類	急性	498	**使用不可** reactive unspecified <=7919 (2887 ～ 21724) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Triazoles (Non-Fused) 1636.06	**使用不可** Cnos_X unreactive excl. HC 17000 (1300～ 2.2E+5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CNOS_X basic aromatic n unreactive, excl. triazine 7100 (410～ 1.2E+5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) Cnos_X reactive fish, excl. n,cC=C 7800 (23～ 2.6E+6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Triazoles (Non-Fused) 1.91	**使用不可** Cnos_X w/o n+ unreactive (Fish chronic) 74 (1.6～ 3400) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	急性	>98.1	**使用不可** reactive unspecified <=18746 (6279 ～ 55972) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Triazoles (Non-Fused) 379.04	**使用不可** Cnos_X unreactive excl. HC 2600 (390～ 18000) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CNOS_X aromatic n unreactive (daphnid) 2200 (180～ 27000) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Triazoles (Non-Fused) 57.07	**使用不可** Cnos_X unreactive excl. HC 100 (3.0～ 3300) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNOS_X basic aromatic n unreactive 270 (2.6～ 29000) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) CNOS_X aromatic n unreactive (daphnid) 170 (2.1～ 13000) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		藻類	急性	14	**使用不可** reactive unspecified <=4690 (474 ～ 46400) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Triazoles (Non-Fused) 32.46	**使用不可** Cos_X excl. HC, pyridine (Alga, Daphnid) 86000 (5.3～ 1.4E+9) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	3.1		**使用可** Triazoles (Non-Fused) 4.47	**使用不可** No applicable results

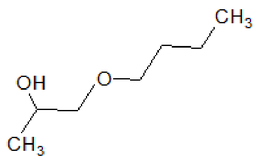
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
11	Nーメチロールアクリルアマイド [別名:Nー(ヒドロキシメチル)アクリルアミド] CAS RN **924-42-5** 備考: MW 101.11 水溶解度(mg/L) ※1 1000000 logP(Kow Win) ※1 -1.8063 logBCFmaxtox ※2 -1.35E+0 LUMO(eV) ※3 3.30E-2～6.46E-1  O=C(NCO)C=C	魚類	急性	356	**使用不可** reactive unspecified <=66347 (23860～1.8E+5) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Acrylamides 326	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用可** Acrylamides 18.27	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=2.3E+5 (68653～7.6E+5) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Acrylamides 784	**使用不可** CNO_X amide unreactive (Daphnid) 2.7E+5 (220～ 3.5E+8) ※P, ※f: 判定不能(logP適用範囲外,麻酔作用を持つ部分構造を含む)
			慢性	実測データなし		**使用可** Acrylamides 2.69	**使用不可** CNO_X amide unreactive (Daphnid) 400 (3.6 ～ 45000) ※P, ※f: 判定不能(logP適用範囲外,麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		藻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=47800 (4460 ～ 5.1E+5) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Acrylamides 0.976	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用可** Acrylamides 0.22	**使用不可** No applicable results

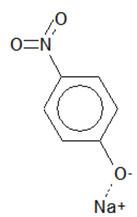
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
12	α－ヒドロ－ω－(ステアロイルオキシ) ポリ(オキシエチレン) CAS RN **9004-99-3** 備考: EO数9の物質について予測 MW 680.95 水溶解度(mg/L) ※1 0.00722959 logP(Kow Win) ※1 5.06 logBCFmaxtox ※2 3.76E+0 LUMO(eV) ※3 1.01E+0 ～1.26E+0  CCCCCCCCCCCCCCCCC(OCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO)=O	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** Esters 1.7321*(0.500 ～ 6.002) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Esters 1.48 ※logP>5.0(溶解度超で影響なし)	**使用可** ○ primary alcohol SCAS 1.9 (0.16～ 23) 水溶解度超 COS_X ester unreactive 1.7 (0.19～ 15) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.059 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.7597*(0.251 ～ 2.297) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 2.22 ※logP>5.0(溶解度超で影響なし)	**使用可** ○ COS_X ester unreactive 4.0 (0.46～ 35) 水溶解度超 CNO_X ester unreactive (Daphnid) 4.1 (0.40～ 43) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters '0.630 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.49 (0.026～ 9.2) 水溶解度超
		藻類	急性	>100	**使用不可** Baseline narcotics 0.93*(0.11 ～ 8.24) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Esters 0.582 水溶解度超で影響なし	**使用可** ○ primary alcohol SCAS 0.11 (0.0031～ 3.9) 水溶解度超 CO_X ester unreactive (Alga) 1.8 (0.18～ 17) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.403 水溶解度超で影響なし	**使用可** CO_X ester unreactive (Alga) 0.39 (0.029～ 5.3) 水溶解度超

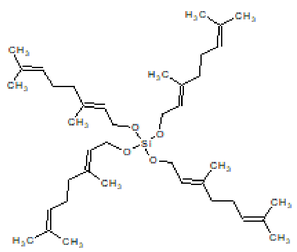
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
13	α－ヒドロ－ω－(オレオイルオキシ) ポリ(オキシエチレン) CAS RN 9004-96-0 備考:EO数9の物質について予測 MW 678.93 水溶解度(mg/L) ※1 0.011373 logP(Kow Win) ※1 4.85 logBCFmaxtox ※2 3.61E+0 LUMO(eV) ※3 9.91E-1 ～1.25E+0  CCCCCCCC/C=C/CCCCCCCC(OCCOCCOCCOCCOCCO CCOCCOCCOCCO)=O	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** Esters 2.3371*(0.684 ～ 7.986) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Esters 1.97 水溶解度超で影響なし	**使用可** ○ primary alcohol SCAS 2.9 (0.25～ 34) 水溶解度超 COS_X ester unreactive 2.3 (0.26～ 20) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.082 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	>100	**使用不可** reactive unspecified <=1.1779 (0.396 ～ 3.501) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Esters 3.03 水溶解度超で影響なし	**使用可** ○ COS_X ester unreactive 5.4 (0.63～ 46) 水溶解度超 CNO_X ester unreactive (Daphnid) 5.5 (0.54～ 56) 水溶解度超
			慢性	実測データなし		**使用可** Esters 0.912 水溶解度超で影響なし	**使用可** CNO_X ester unreactive (Daphnid) 0.65 (0.036～ 12) 水溶解度超
		藻類	急性	>3.02	**使用不可** Baseline narcotics 1.39 (0.16 ～ 12.2) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Esters 0.820 水溶解度超で影響なし	**使用可** ○ primary alcohol SCAS 0.21 (0.0067～ 6.3) 水溶解度超 CO_X ester unreactive (Alga) 2.6 (0.28～ 24) 水溶解度超
			慢性	1.9		**使用可** Esters 0.530 水溶解度超で影響なし	**使用可** CO_X ester unreactive (Alga) 0.59 (0.045～ 7.6) 水溶解度超

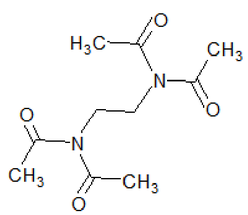
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
14	3，3’ーチオジプロピオン酸 CAS RN **111-17-1** 備考： MW 178.2 水溶解度(mg/L) ※1 176641.42 logP(Kow Win) ※1 -0.18 logBCFmaxtox ※2 -1.32E-1 LUMO(eV) ※3 -1.79E-1～2.53E-1  O=C(CCSCCC(O)=O)O	魚類	急性	>99.1	**使用不可** reactive unspecified <=5042 (1841～13808) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Neutral Organics 1.3E+5 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CNOS_X acid general 3500 (210～ 60000) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 10173.47	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	73.1	**使用不可** reactive unspecified <=11319 (3874 ～ 33071) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Neutral Organics 61268.96 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	9.81		**使用可** Neutral Organics 3415.32	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	50.1	**使用不可** reactive unspecified <=4090 (429 ～ 38900) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Neutral Organics 19882.01	**使用不可** No applicable results
			慢性	30		**使用可** Neutral Organics 3328.05	**使用不可** No applicable results

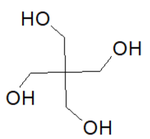
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
15	2ーイソブチルー4ーメチルオキサンー4ーオール CAS RN **63500-71-0** **MITI5-7058** 備考: MW 172.27 水溶解度(mg/L) ※1 2773.44 logP(Kow Win) ※1 2.1605 logBCFmaxtox ※2 1.61 LUMO(eV) ※3 2.76～3.11  CC(C)CC1OCCC(C)(O)C1	魚類	急性	350	**使用可** Baseline narcotics 209.4998 (77.148 ～ 568.906)	**使用可** Neutral Organics 101.55	**使用可** CO_X ether unreactive 110 (8.5～ 1300) CO_X alcohol unreactive Fish 200 (25～ 1600) ○ narcotic group (Fish acute) 120 (19～ 820)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 10.1	**使用可** narcotic group (Fish chronic) 2.5 (0.18～ 35)
		甲殻類	急性	>320	**使用不可** Baseline narcotics 152.4355 (57.091 ～ 407.010) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 58.52	**使用可** CO_X ether unreactive 44 (3.3～ 580) CO_X alcohol unreactive 61 (1.8～ 2100) CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 62 (4.3～ 900) ○ narcotic group (Daphnid acute) 27 (4.0～ 180)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 5.95	**使用可** ○ CO_X ether unreactive 0.92 (0.017～ 50) CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 4.6 (0.22～ 98)
		藻類	急性	>100	**使用不可** Baseline narcotics 51.6 (5.95 ～ 447) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 46.35	**使用可** ○ CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 71 (12～ 410) CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 84 (3.6～ 1900) narcotic group (Alga acute) 120 (13～ 990)
			慢性	>=100		**使用可** Neutral Organics 12.54	**使用可** ○ CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 6.2 (0.67～ 58) CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 14 (0.34～ 560)

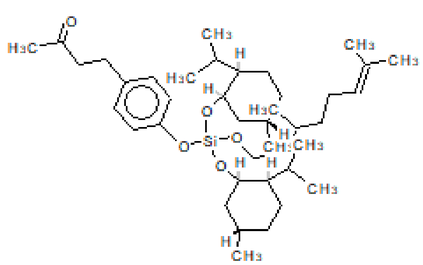
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
16	1－ブトキシー2－プロパノール CAS RN **5131-66-8** 備考: MW 132.2 水溶解度(mg/L) ※1 42101 logP(Kow Win) ※1 0.9842 logBCFmaxtox ※2 7.34E-1 LUMO(eV) ※3 2.64E+0～3.13E+0  CC(COCCCC)O	魚類	急性	748	**使用不可** Baseline narcotics 1389 (511～3771) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 887	**使用可** CO_X ether unreactive 830 (65 ～ 10000) ○ CO_X alcohol less unreactive (EO mitigated) 600 (78 ～ 4500)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 77.66	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	>100	**使用不可** Baseline narcotics 1438 (539～3834) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 459	**使用不可** CO_X ether unreactive 430 (24 ～ 7600) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 34.46	**使用可** CO_X ether unreactive 14 (0.25 ～ 780)
		藻類	急性	>1000	**使用不可** Baseline narcotics 351 (39.1 ～ 3160) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 232	**使用不可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 560 (76 ～ 4100) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	560		**使用可** Neutral Organics 49.28	**使用可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 31 (3.1 ～ 310)

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
17	p－ニトロフェノールナトリウム CAS RN **824-78-2** 備考: 酸として予測 MW 138.1 水溶解度(mg/L) ※1 11600 logP(Kow Win) ※1 1.91 logBCFmaxtox ※2 1.42E+0 LUMO(eV) ※3 -1.06E+0～-1.06E+0  [O]c1ccc(cc1)N(=O)=O	魚類	急性	3.8	**使用可** Phenols and anilines 18.8304 (7.379 ～ 48.056)	**使用可** Phenols 21.92	**使用可** CNO_X nitro mono unreactive 34 (7.7～ 150)
			慢性	0.643		**使用可** Phenols 2.15	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	4.7	**使用可** Phenols and anilines 11.3511 (3.998 ～ 32.230)	**使用可** Phenols 9.11	**使用可** CNO_X nitro mono unreactive (Daphnid) 22 (5.9～ 82)
			慢性	1.3		**使用可** Phenols 0.981	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	0.25	**使用不可** Baseline narcotics 66.5 (7.63 ～ 580) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Phenols 1.92	**使用不可** No applicable results
			慢性	10		**使用可** Phenols 3.99	**使用可** CNO_X nitro mono unreactive 2.6 (0.095～ 69)

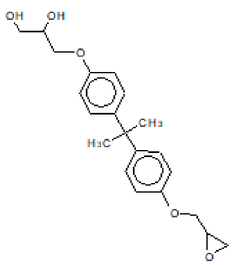
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
18	テトラキス{[(2E)－3，7－ジメチルオクター2，6－ジエン－1－イル]オキシ}シランを主成分(70%以上)とする、テトラエトキシシランと(2E)－3，7－ジメチルオクター2，6－ジエン－1－オールの反応生成物(分子構造中に(2E)－3，7－ジメチルオクター2，6－ジエン-1-イル基を3つ以上含むものに限る。) MITI_2-4205 備考： 主成分について予測 MW 641.05 水溶解度(mg/L) ※1 3.7079E-11 logP(Kow Win) ※1 17.48 logBCFmaxtox ※2 -8.81E-1 LUMO(eV) ※3 6.87E-1 ～9.87E-1  C/C(CC/C=C(C)/C)=C¥CO[Si](OC/C=C(C)/CC/C=C(C)/C)(OC/C=C(C)/CC/C=C(C)/C)OC/C=C(C)/CC/C=C(C)/C	魚類	急性	>0.07	**使用不可** reactive unspecified <=1.7E+5* (62376 ～ 4.7E+5) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Alkoxy Silanes 1.4E-6 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**予測不能**
			慢性	実測データなし		**使用不可** Alkoxy Silanes 2.4E-09 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし) ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**予測不能**
		甲殻類	急性	>0.027	**使用不可** reactive unspecified <=4.5E+5* (1.5E+5～1.4E+6) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Alkoxy Silanes 0.141 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**予測不能**
			慢性	実測データなし		**使用不可** Alkoxy Silanes 3.E-8 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし) ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**予測不能**
		藻類	急性	>0.0049	**使用不可** reactive unspecified <=2.2E-8 (±1E-9) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Alkoxy Silanes 0.204 ※logP>6.4(水溶解度超で影響なし)	**予測不能**
			慢性	>=0.0049		**使用可** Alkoxy Silanes 0.026 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし)	**予測不能**

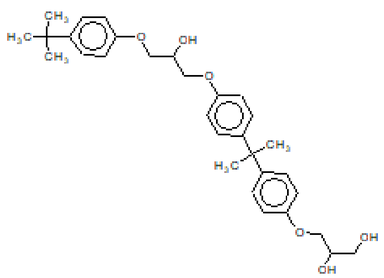
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
19	エチレンビス(ジアセトアミド) CAS RN **10543-57-4** **MITI_2-3577** 備考: MW 228.25 水溶解度(mg/L) ※1 157396.47 logP(Kow Win) ※1 -2.36 logBCFmaxtox ※2 -1.76E+0 LUMO(eV) ※3 -1.25E-1～4.77E-1  CC(=O)N(CCN(C(C)=O)C(C)=O)C(C)=O	魚類	急性	>140	**使用不可** reactive unspecified <=3.9E+5 (1.4E+5 ～1.1E+6) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Imides 381.26	**使用不可** QSAR式なし
			慢性	実測データなし		**使用可** Imides 3003.98	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	>1000	**使用不可** reactive unspecified <=1.6E+6* (4.6E+5～5.8E+6) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Imides 2732.53	**使用不可** QSAR式なし
			慢性	500		**使用可** Imides 3913.97	**使用不可** QSAR式なし
		藻類	急性	＞1000	**使用不可** reactive unspecified <=3.0E+5 (26700～3.4E+6) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Imides 40.71	**使用不可** QSAR式なし
			慢性	655		**使用可** Imides 0.591	**使用不可** QSAR式なし

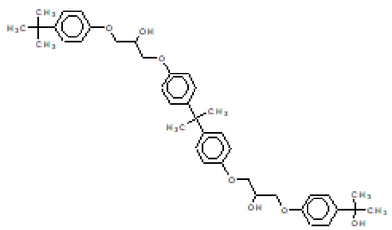
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
20	ペンタエリトリトール CAS RN **115-77-5** 備考: MW 136.15 水溶解度(mg/L) ※1 75562.56 logP(Kow Win) ※1 -1.77 logBCFmaxtox ※2 -1.32E+0 LUMO(eV) ※3 2.65E+0～2.91E+0  OCC(CO)(CO)CO	魚類	急性	>100	**使用不可** Baseline narcotics 2.5E+5 (90473 ～ 6.9E+5) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 2.7E+5 水溶解度超で影響なし	**使用不可** primary alcohol SCAS 2.7E+5 (23000 ～ 3.2E+6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol unreactive Fish 6.1E+5 (65000 ～ 5.7E+6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) narcotic group (Fish acute) 3.2E+5 (45000 ～ 2.3E+6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 17525.82	**使用不可** narcotic group (Fish chronic) 1300 (23 ～ 71000) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	急性	>1000	**使用不可** Baseline narcotics 5.6E+5 (1.8E+5～1.8E+6) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 1.1E+5 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X alcohol unreactive 74000 (570 ～ 9.6E+6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 37000 (1100 ～ 1.2E+6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) narcotic group (Daphnid acute) 13000 (1400 ～ 1.1E+5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	1000		**使用可** Neutral Organics 4014.24	**使用不可** CO_X alcohol unreactive (w/o EO) (daphnid) 650 (20 ～ 21000) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	>1000	**使用不可** Baseline narcotics 59800 (5600 ～ 6.4E+5) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 19161.61	**使用不可** primary alcohol SCAS 9.1E+6 (4800 ～ 1.7E+10) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 2.9E+6 (15000 ～ 5.6E+8) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) narcotic group (Alga acute) 6.4E+5 (37000 ～ 1.1E+7) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	>=1000		**使用可** Neutral Organics 2312.8	**使用不可** CO_X alcohol unreactive C-OH w/o (acid, EO) 1.9E+5 (1200 ～ 3.2E+7) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

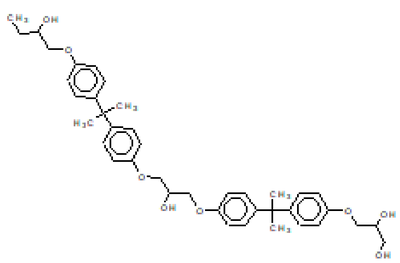
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
21	4－(4－{[{[(2E)－3, 7－ジメチルオクター2, 6－ジエン－1－イル]オキシ}(ビス{[(1R, 2S, 5R)－2－イソプロピル－5－メチルシクロヘキシル]オキシ})シリル]オキシ}フェニル)ブタン－2－オンを主成分とする、(1R, 2S, 5R)－2－イソプロピル－5－メチルシクロヘキサン－1－オールと(2E)－3, 7－ジメチルオクター2, 6－ジエン－1－オールとテトラエトキシシランと4－(4－ヒドロキシフェニル)ブタン－2－オンの反応生成物(分子構造中に(1R, 2S, 5R)－2－イソプロピル－5－メチルシクロヘキシル基又は4－(3－オキソブチル)フェニル基又は(2E)－3, 7－ジメチルオクター2, 6－ジエン－1－イル基を合計3つ以上含むものに限る。) **MITI_3-4686** 備考: 主成分について予測 MW 655.04 水溶解度(mg/L) ※1 2.7714E-09 logP(Kow Win) ※1 15.18 logBCFmaxtox ※2 8.36E-1 LUMO(eV) ※3 -3.33E-2 ～3.44E-1  CC(C)C1CCC(C)CC1O[Si](OC/C=C(C)/CC/C=C(C)/C)(OC1CC(C)CCC1C(C)C)Oc1ccc(CCC(C)=O)cc1	魚類	急性	>0.16	**使用不可** reactive unspecified <=1731* (638～4701) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Alkoxy Silanes 1.6E-5 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**予測不能**
			慢性	実測データなし		**使用不可** Alkoxy Silanes 4.5E-8 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし) ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**予測不能**
		甲殻類	急性	>0.26	**使用不可** reactive unspecified <=2627* (966 ～ 7148) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Alkoxy Silanes 0.321 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**予測不能**
			慢性	実測データなし		**使用不可** Alkoxy Silanes 3.8E-7 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし) ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**予測不能**
		藻類	急性	>0.022	**使用不可** reactive unspecified <=1.6E-6 (±1E-7) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Alkoxy Silanes 0.305 ※logP>6.4(水溶解度超で影響なし)	**予測不能**
			慢性	>=0.022		**使用可** Alkoxy Silanes 0.061 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし)	**予測不能**

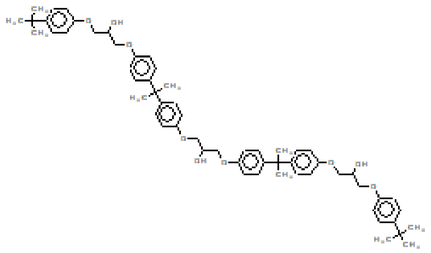
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
22	n－ヘプタデカン CAS RN **629-78-7** 備考: MW 240.48 水溶解度(mg/L) ※1 0.00034315 logP(Kow Win) ※1 8.6901 logBCFmaxtox ※2 3.43E+0 LUMO(eV) ※3 3.48E+0～3.67E+0 CCCCCCCCCCCCCCCC	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 4.0822 (1.478 ～ 11.274) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用不可** Neutral Organics 0.00019 ※logP>5.0	**使用不可** C_X HC aliphatic w/o X 0.00046 (1.7E-5～ 0.012) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) narcotic group (Fish acute) 0.00024 (3.3E-5～ 0.0018) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用不可** Neutral Organics 3.9E-5 ※logP>8.0	**使用不可** C_X HC w/ w/o X (unreactive) 9.9E-5 (1.7E-6～ 0.0056) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) Cnos_X w/o n+ unreactive (Fish chronic) 8.1E-5 (1.5E-6～ 0.0043) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) narcotic group (Fish chronic) 7.2E-5 (2.1E-6～ 0.0025) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 1.3239 (0.426 ～ 4.117) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用不可** Neutral Organics 0.0002 ※logP>5.0	**使用不可** C_X aliphatic w/o X 0.00024 (6.2E-6～ 0.0094) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) narcotic group (Daphnid acute) 0.00094 (0.00011～ 0.0080) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用不可** Neutral Organics 0.00011 ※logP>8.0	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 0.00039 (3.5E-5 ～ 0.0043) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 0.002 ※logP>6.4(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** narcotic group (Alga acute) 6.6E-5 (4.0E-6～ 0.0011) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.002 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** No applicable results

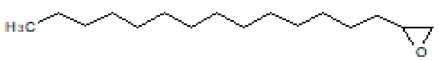
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
23	[2－(クロロメチル)オキシラン・4，4'－(プロパン－2，2－ジイル)ジフェノール重縮合物]・4－tert－ブチルフェノール・4，4'－(プロパン－2，2－ジイル)ジフェノール重付加物 MITI_7-3448						
23-1	成分A 備考：毒性の算出に用いられた定量可能な5成分のうちの1成分。 「m/z 358.4」との情報から構造を推測 MW 358.43 水溶解度(mg/L) ※1 12.64 logP(Kow Win) ※1 3.09 logBCFmaxtox ※2 2.31E+0 LUMO(eV) ※3 1.23E-1～4.99E-1  CC(C1=CC=C(OCC(O)CO)C=C1)(C)C2=CC=C(OCC3OC3)C=C2	魚類	急性	>0.9	**使用不可** reactive unspecified <=25.2148 (9.323 ～ 68.195) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Epoxides, Mono 9.11	**使用不可** CO_X alcohol less unreactive (EO mitigated) 28 (2.6～ 310) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Epoxides, Mono 0.011	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	>0.57	**使用不可** reactive unspecified <=21.3228 (7.911 ～ 57.474) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Epoxides, Mono 15.23 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用不可** Epoxides, Mono 1.46 ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	>0.93	**使用不可** reactive unspecified <=19.1 (2.23 ～ 164) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Epoxides, Mono 12.85 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
			慢性	>=0.93		**使用可** Epoxides, Mono 12.41	**使用不可** No applicable results

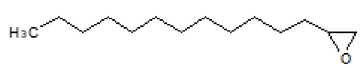
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
23-2	成分B 備考: 毒性の算出に用いられた定量可能な5成分のうちの1成分。 「m/z 508.5」との情報から構造を推測 MW 508.65 水溶解度(mg/L) ※1 0.0035573 logP(Kow Win) ※1 6.15 logBCFmaxtox ※2 4.41E+0 LUMO(eV) ※3 4.8E-3～4.65E-1  CC(C)(C)C1=CC=C(OCC(O)COC2=CC=C(C(C3=CC=C(OCC(O)CO)C=C3)(C)C)C=C2)C=C1	魚類	急性	>0.9	**使用不可** Baseline narcotics 0.1727*(0.063 ～ 0.474) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 0.079 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** primary alcohol SCAS 0.17 (0.012～ 2.3) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X ether unreactive 0.12 (0.0082～ 1.7) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol less unreactive (EO mitigated) 0.11 (0.0042～ 3.2) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.012 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	>0.57	**使用不可** Baseline narcotics 0.0668*(0.021 ～ 0.215) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 0.066 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive 0.024 (0.0011～ 0.51) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.019 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ether unreactive 0.00011 (5.4E-7～ 0.024)
		藻類	急性	>0.93	**使用不可** Baseline narcotics 0.093*(0.01 ～ 0.86) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 0.239 水溶解度超で影響なし	**使用不可** primary alcohol SCAS 0.0036 (0.000041～ 0.31) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 0.079 (0.0083～ 0.75) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	>=0.93		**使用可** Neutral Organics 0.147 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 0.033 (0.0023～ 0.45) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

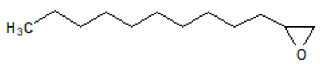
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
23-3	成分C 備考: 毒性の算出に用いられた定量可能な5成分のうちの1成分。 「m/z 642.5」との情報から構造を推測 MW 642.82 水溶解度(mg/L) ※1 5.5732E-06 logP(Kow Win) ※1 8.41 logBCFmaxtox ※2 3.64E+0 LUMO(eV) ※3 6.27E-2～3.72E-1  CC(C1=CC=C(OCC(O)COC2=CC=C(C(O)(C)C)C=C2)C=C1)(C)C3=CC=C(OCC(O)COC4=CC=C(C(C)(C)C)C=C4)C=C3	魚類	急性	>0.9	**使用不可** Baseline narcotics 1.5416*(0.566 ～ 4.195) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Benzyl Alcohols 0.00044 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** 0.0017 (9.5E-5～ 0.031) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol less unreactive (EO mitigated) 0.0019 (3.0E-5～ 0.12) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	>0.57		**使用不可** Benzyl Alcohols 0.00016 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし) ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 0.7913*(0.268 ～ 2.339) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Benzyl Alcohols 0.00058 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive 0.00023 (3.9E-6～ 0.014) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用不可** Benzyl Alcohols 0.00049 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし) ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用不可** CO_X ether unreactive 4.8E-7 (5.7E-10～0.00041) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	>0.93	**使用不可** Baseline narcotics 0.0018*(0.00016 ～ 0.019) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Benzyl Alcohols 0.0030 ※logP>6.4(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 0.0011 (5.1E-5～ 0.025) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	>=0.93		**使用可** Benzyl Alcohols 0.0083 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 0.0011 (4.6E-5～ 0.028) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)

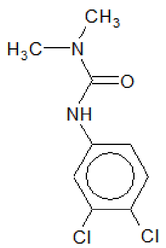
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
23-4	成分D 備考: 毒性の算出に用いられた定量可能な5成分のうちの1成分。 「m/z 658.4」との情報から構造を推測 MW 658.82 水溶解度(mg/L) ※1 9.0787E-5 logP(Kow Win) ※1 6.86 logBCFmaxtox ※2 4.49E+0 LUMO(eV) ※3 4.67E-3～3.54E-1  CC(C1=CC=C(OCC(O)CO)C=C1)(C)C2=CC=C(OCC(O)CO)C3=CC=C(C(C4=CC=C(OCC(O)CC)C=C4)(C)C)C=C3)C=C2	魚類	急性	>0.9	**使用不可** Baseline narcotics 0.1810*（ 0.066 ～ 0.497） ※D: 判定不能（適用範囲外）	**使用可** Neutral Organics 0.023 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** primary alcohol SCAS 0.053 (0.0036～ 0.79) ※P: 判定不能（logP適用範囲外） CO_X ether unreactive 0.037 (0.0024～ 0.57) ※P+: 判定不能（logP適用範囲外） CO_X alcohol less unreactive (EO mitigated) 0.038 (0.0011～ 1.3) ※P+: 判定不能（logP適用範囲外）
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.0039 水溶解度超で影響なし	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	>0.57	**使用不可** Baseline narcotics 0.0677*（ 0.021 ～ 0.221） ※D: 判定不能（適用範囲外）	**使用可** Neutral Organics 0.021 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive 0.0066 (0.00023～ 0.19) ※P+: 判定不能（logP適用範囲外）
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.0070 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ether unreactive 2.4E-5 (7.6E-8～ 0.0078) ※P+: 判定不能（logP適用範囲外）
		藻類	急性	>0.93	**使用不可** Baseline narcotics 0.032*（ 0.0033 ～ 0.31） ※D: 判定不能（適用範囲外）	**使用可** Neutral Organics 0.099 ※logP>6.4(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** primary alcohol SCAS 0.00058 (3.2E-6～ 0.10) ※P: 判定不能（logP適用範囲外） CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 0.025 (0.0020～ 0.30) ※P+: 判定不能（logP適用範囲外）
			慢性	>=0.93		**使用可** Neutral Organics 0.070 水溶解度超で影響なし	**使用不可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 0.013 (0.00083～ 0.22) ※P: 判定不能（logP適用範囲外）

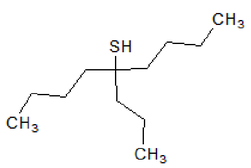
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
23-5	成分F 備考: 毒性の算出に用いられた定量可能な5成分のうちの 1成分。 「m/z 926.6」との情報から構造を推測 MW 925.2 水溶解度(mg/L) ※1 1.9703E-12 logP(Kow Win) ※1 13.74 logBCFmaxtox ※2 5.37E-3 LUMO(eV) ※3 5.37E-3～3.82E-1  CC(C1=CC=C(OCC(O)COC2=CC=C(C(C)(C)C3=CC=C(OCC(COC4=CC=C(C(C)(C)C)C=C4)O)C=C3)C=C2)C=C1)(C)C5=CC=C(OCC(COC6=CC=C(C(C)(C)C)C=C6)O)C=C5	魚類	急性	>0.9	**使用不可** Baseline narcotics 46189* (16844 ～ 126657) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 2.2E-8 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive 6.6E-8 (1.6E-9～ 2.6E-6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外) CO_X alcohol less unreactive (EO mitigated) 9.9E-8 (1.8E-10～5.3E-5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 7.7E-9 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	>0.57	**使用不可** Baseline narcotics 108519* (36667 ～ 321174) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 3.8E-8 ※logP>5.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive 3.4E-9 (2.8E-12～ 4.0E-6) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 7.3E-8 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive 9.7E-13 (2.4E-17～ 3.9E-8) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
		藻類	急性	>0.93	**使用不可** Baseline narcotics 1.3E-7 (±6.5E-9) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 2.4E-6 ※logP>6.4(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 4.2E-8 (1.8E-10～ 1.0E-5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	>=0.93		**使用可** Neutral Organics 7.1E-6 ※logP>8.0(水溶解度超で影響なし)	**使用不可** CO_X ether unreactive excl HRAC (Alga) 3.4E-7 (2.5E-9～4.6E-5) ※P: 判定不能(logP適用範囲外)

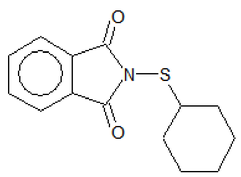
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
24	2－テトラデシルオキシラン CAS RN 7320-37-8 備考: MW 240.43 水溶解度(mg/L) ※1 0.045351 logP(Kow Win) ※1 6.7565 logBCFmaxtox ※2 4.50 LUMO(eV) ※3 2.62～2.68  O(C1CCCCCCCCCCCCCC)C1	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.1915*（ 0.069 ～ 0.532） 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Epoxides,mono 0.061 ※logP>5.0(溶解度超で影響なし)	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用可** Epoxides,mono 0.00040	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.0472（ 0.014 ～ 0.164） 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Epoxides,mono 0.030 ※logP>5.0	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用不可** Epoxides,mono 0.0027 ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用不可** QSAR式なし
		藻類	急性	0.00221	**使用不可** reactive unspecified <=0.014（ 0.0015 ～ 0.14） 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Epoxides,mono 0.010 ※logP>6.4	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00143		**使用可** Epoxides,mono 0.034	**使用不可** No applicable results

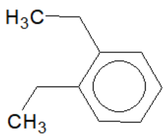
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
25	2ードデシルオキシラン CAS RN 3234-28-4 備考: MW 212.38 水溶解度(mg/L) ※1 0.44232 logP(Kow Win) ※1 5.7743 logBCFmaxtox ※2 4.23E+0 LUMO(eV) ※3 2.61E+0～2.68E+0  CCCCCCCCCCCCC1OC1	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.3404 (0.123 ～ 0.942) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Epoxides,mono 0.185 ※logP>5.0	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用可** Epoxides,mono 0.00077	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=0.0935 (0.028 ～ 0.312) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Epoxides,mono 0.125 ※logP>5.0	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用不可** Epoxides,mono 0.012 ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	0.00236	**使用不可** reactive unspecified <=0.078 (0.0086 ～ 0.7) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Epoxides,mono 0.055	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.00165		**使用可** Epoxides,mono 0.131	**使用不可** No applicable results

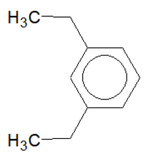
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
26	2ーデシルオキシラン CAS RN 2855-19-8 備考: MW 184.32 水溶解度(mg/L) ※1 4.24 logP(Kow Win) ※1 4.79 logBCFmaxtox ※2 3.57E+0 LUMO(eV) ※3 2.63E+0 ～2.69E+0  O(C1CCCCCCCCCC)C1	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** reactive unspecified <=1.5642 (0.570 ～ 4.295) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Epoxides, Mono 0.552	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用可** Epoxides, Mono 0.0014	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	0.171	**使用不可** reactive unspecified <=0.5515 (0.180 ～ 1.692) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Epoxides, Mono 0.519	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用不可** Epoxides, Mono 0.049 ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用不可** QSAR式なし
		藻類	急性	0.057	**使用不可** reactive unspecified <=0.42 (0.048 ～ 3.65) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Epoxides, Mono 0.290	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.0042		**使用可** Epoxides, Mono 0.497	**使用不可** No applicable results

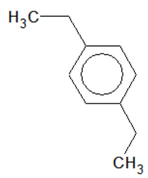
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
27	3－(3，4－ジクロロフェニル)－1，1－ジメチル尿素 CAS RN **330-54-1** (旧三監211) 備考: MW 233.1 水溶解度(mg/L) ※1 34.057 logP(Kow Win) ※1 2.6726 logBCFmaxtox ※2 1.99E+0 LUMO(eV) ※3 -5.51E-1～-1.09E-1  ClC1=C(C=C(C=C1)NC(N(C)C)=O)Cl	魚類	急性	14.2	**使用可** Baseline narcotics 27.0252 (9.974 ～ 73.224)	**使用可** Substitued Ureas 18.1	**使用可** ○ tentative CNOS_X halogen, unreactive 25 (3.9～ 160) urea unreactive 11 (2.1～ 60) ※P+: 判定不能(logP適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Substitued Ureas 0.5	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	1.9	**使用不可** Baseline narcotics 28.6163 (10.610 ～ 77.181) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Substitued Ureas 5.22	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.56		**使用可** Substitued Ureas 0.55	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	0.025	**使用不可** Baseline narcotics 27 (3.14 ～ 232) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Substitued Ureas 0.177	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用可** Substitued Ureas 0.07	**使用不可** No applicable results

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
28	tertードデカンチオール CAS RN **25103-58-6** 備考: MW 202.40 水溶解度(mg/L) ※1 0.3407 logP(Kow Win) ※1 6.07 logBCFmaxtox ※2 4.38E+0 LUMO(eV) ※3 8.41E-1～9.4E-1  SC(CCC)(CCCC)CCCC	魚類	急性	0.377	**使用不可** reactive unspecified <=0.1060 (0.039 ～ 0.291) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Thiols and Mercaptans 0.012	**使用不可** No applicable results
			慢性	実測データなし		**使用不可** Thiols and Mercaptans 0.0022 ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用不可** QSAR式なし
		甲殻類	急性	0.0746	**使用不可** reactive unspecified <=0.0364 (0.011 ～ 0.118) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Thiols and Mercaptans 0.022 ※logP>5.0	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.0108		**使用不可** Thiols and Mercaptans 0.002 ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	>4.14	**使用不可** reactive unspecified <=0.043 (0.0047 ～ 0.39) 判定不能(minimum toxicity)	**使用不可** Thiols and Mercaptans 0.021 ※logP>2.9	**使用不可** QSAR式なし
			慢性	>=4.14		**使用可** Thiols and Mercaptans 0.016	**使用不可** No applicable results

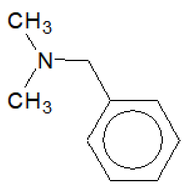
#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
29	N－(シクロヘキサン－1－イルスルファニル)フタルイミド CAS RN 17796-82-6 備考: MW 261.34 水溶解度(mg/L) ※1 22.0 logP(Kow Win) ※1 3.76 logBCFmaxtox ※2 2.8E+0 LUMO(eV) ※3 -1.16E+0 ～-1.13E+0  O=C(N(SC(CCCC1)C1)C(=O)c2cccc3)c23	魚類	急性	0.41	**使用不可** Baseline narcotics 3.068 (1.129 ～ 8.339) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Imides 1.87 ○ Thiophthalimides 0.026	**使用不可** CNOS_X N-hetero unreactive (w/o amine, aldoxime, carbamate) 0.30 (0.00019～ 470) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Imides 0.164 ○ Thiophthalimides 0.0065	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	>0.13	**使用不可** Baseline narcotics 2.6264 (0.940 ～ 7.336) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Imides 1.73 ○ Thiophthalimides 0.543	**使用不可** CNOS_X N-hetero unreactive (w/o amine, aldoxime, carbamate) 0.31 (0.0012～ 84) ※P+, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			慢性	>=0.14		**使用可** ○ Imides 0.306 Thiophthalimides 0.0077 ※急性予測値にACRを用いて作成した式により算出	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	24.8	**使用不可** Baseline narcotics 4.03 (0.47 ～ 34.6) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Imides 0.274 ○ Thiophthalimides 0.265	**使用不可** No applicable results
			慢性	13		**使用可** ○ Imides 0.041 Thiophthalimides 0.128	**使用不可** CNOS_X N-hetero unreactive (w/o amine, aldoxime, carbamate) 0.0023 (7.4E-7～ 7.0) ※P, ※F: 判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果		TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
30	ジエチルベンゼン CAS RN 25340-17-4			25340-17-4	各異性体			
30-1	1,2-DEB CAS RN 135-01-3 備考: 25340-17-4中の含有量5-6% MW 134.22 水溶解度(mg/L) ※1 71.1 logP(Kow Win) ※1 4.0698(計算値) ＊3.72(実測値) logBCFmaxtox ※2 3.03E+0 LUMO(eV) ※3 5.37E-1～5.56E-1  CCc1ccccc1CC	魚類	急性	0.673	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 1.7991 (0.664 ～ 4.877) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 1.05 ＊3.15	**使用可** C_X_aromatic w/o X, fused R=0 2.6 (0.64 ～ 10) ＊4.5 (1.1 ～ 18) ○ narcotic group (Fish acute) 1.9 (0.28 ～ 12) ＊3.9 (0.58 ～ 26)
			慢性	実測データなし	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.19 ＊0.37	**使用可** C_X HC w/ w/o X (unreactive) 0.087 (0.0066 ～ 1.1) ＊0.15 (0.011 ～ 2.0) Cnos_X w/o n+ unreactive (Fish chronic) 0.079 (0.0062 ～ 0.99) ＊0.14 (0.011 ～ 1.7) ○ narcotic group (Fish chronic) 0.083 (0.0073 ～ 0.94) ＊0.15 (0.013 ～ 1.7)
		甲殻類	急性	2.01	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 1.0795 (0.384 ～ 3.032) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 1.05 ＊2.09	**使用可** C_X_aromatic w/o X, fused R=0 1.1 (0.32 ～ 3.8) ＊1.6 (0.47 ～ 5.8) narcotic group (Daphnid acute) 0.95 (0.14 ～ 6.3) ＊1.7 (0.26 ～ 11)
			慢性	実測データなし	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.17 ＊0.32	**使用可** C_X_aromatic w/o X, fused R=0 0.15 (0.030 ～ 0.72) ＊0.28 (0.058 ～ 1.4)
		藻類	急性	1.21	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 1.16 (0.13 ～ 10) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 1.72 ＊3.01	**使用可** narcotic group (Alga acute) 1.2 (0.15 ～ 10) ＊2.7 (0.33 ～ 22)
			慢性	0.547	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.69 ＊1.12	**使用不可** No applicable results

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果		TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
30-2	1,3-ジエチルベンゼン CAS RN 141-93-5 備考: 25340-17-4中の含有量60-65%  CCc1cccc(CC)c1	魚類	急性	0.673	4.15	**使用可** Baseline narcotics 1.7995 (0.664 ～ 4.878)	**使用可** Neutral Organics 1.53 ＊0.542	**使用可** C_X_aromatic w/o X, fused R=0 2.6 (0.64 ～ 10) ＊1.2 (0.29 ～ 4.7) ○ narcotic group (Fish acute) 1.9 (0.28 ～ 12) ＊0.67 (0.10 ～ 4.4)
	MW 134.22 水溶解度(mg/L) ※1 24 logP(Kow Win) ※1 4.0698(計算値) ＊ 4.57(実測値) logBCFmaxtox ※2 3.03E+0 LUMO(eV) ※3 5.38E-1～5.82E-1		慢性	実測データなし	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.187 ＊0.07	**使用可** C_X HC w/ w/o X (unreactive) 0.087 (0.0066 ～ 1.1) ＊0.039 (0.0029 ～ 0.54) Cnos_X w/o n+ unreactive (Fish chronic) 0.079 (0.0062 ～ 0.99) ＊0.035 (0.0027 ～ 0.46) ○ narcotic group (Fish chronic) 0.083 (0.0073 ～ 0.94) ＊0.036 (0.0031 ～ 0.42)
		甲殻類	急性	2.01	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 1.0796 (0.384 ～ 3.032) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 1.05 ＊0.390	**使用可** C_X_aromatic w/o X, fused R=0 1.1 (0.32 ～ 3.8) ＊0.61 (0.18 ～ 2.1) ○ narcotic group (Daphnid acute) 0.95 (0.14 ～ 6.3) ＊0.42 (0.064 ～ 2.8)
			慢性	実測データなし	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.174 ＊0.07	**使用可** C_X_aromatic w/o X, fused R=0 0.15 (0.030 ～ 0.72) ＊0.058 (0.012 ～ 0.29)
		藻類	急性	1.21	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 1.16 (0.13 ～ 10) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 1.72 ＊0.776	**使用可** narcotic group (Alga acute) 1.2 (0.15 ～ 10) ＊0.40 (0.047 ～ 3.3)
			慢性	0.547	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.690 ＊0.34	**使用不可** No applicable results

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果		TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
30-3	1,4-ジエチルベンゼン CAS RN 105-05-5 備考: 25340-17-4中の含有量27-30% MW 134.22 水溶解度(mg/L) ※1 24.8 logP(Kow Win) ※1 4.0698(計算値) ＊4.58(実測値) logBCFmaxtox ※2 3.03E+0 LUMO(eV) ※3 5.05E-1～5.23E-1  CCc1ccc(CC)cc1	魚類	急性	0.673	1.8	**使用不可** Baseline narcotics 1.7748 (0.655 ～ 4.811) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 1.53 ＊0.531	**使用可** C_X_aromatic w/o X, fused R=0 2.6 (0.64 ～ 10) ＊1.1 (0.28 ～ 4.7) ○ narcotic group (Fish acute) 1.9 (0.28 ～ 12) ＊0.65 (0.098 ～ 4.4)
			慢性	実測データなし	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.19 ＊0.07	**使用可** C_X HC w/ w/o X (unreactive) 0.087 (0.0066 ～ 1.1) ＊0.038 (0.0028 ～ 0.53) Cnos_X w/o n+ unreactive (Fish chronic) 0.079 (0.0062 ～ 0.99) ＊0.034 (0.0026 ～ 0.45) ○ narcotic group (Fish chronic) 0.083 (0.0073 ～ 0.94) ＊0.036 (0.0031 ～ 0.41)
		甲殻類	急性	2.01	32	**使用不可** Baseline narcotics 1.0703 (0.384 ～ 3.032) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 1.05 ＊0.383	**使用可** C_X_aromatic w/o X, fused R=0 1.1 (0.32 ～ 3.8) ＊0.61 (0.17 ～ 2.1) ○ narcotic group (Daphnid acute) 0.95 (0.14 ～ 6.3) ＊0.42 (0.063 ～ 2.8)
			慢性	実測データなし	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.17 ＊0.07	**使用可** C_X_aromatic w/o X, fused R=0 0.15 (0.030 ～ 0.72) ＊0.057 (0.011 ～ 0.28)
		藻類	急性	1.21	1.9	**使用不可** Baseline narcotics 1.16 (0.13 ～ 10) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 1.72 ＊0.764	**使用可** narcotic group (Alga acute) 1.2 (0.15 ～ 10) ＊0.39 (0.046 ～ 3.2)
			慢性	0.547	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.69 ＊0.34	**使用不可** No applicable results

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
31	1H－インデン CAS RN 95-13-6 備考: MW 116.16 水溶解度(mg/L) ※1 389.15 logP(Kow Win) ※1 3.25 logBCFmaxtox ※2 2.43E+0 LUMO(eV) ※3 5.44E-2 ～5.44E-2 c(c(C=C1)ccc2)(c2)C1	魚類	急性	実測データなし	**使用不可** Baseline narcotics 5.8735 (2.171 ～ 15.890) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 7.18	**使用不可** C_X aromatic HC wo X, R3=0 5.5 (1.9～ 15) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外) narcotic group (Fish acute) 8.8 (1.3～ 58) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.804	**使用不可** C_X HC w/ w/o X (unreactive) 0.28 (0.020～ 3.8) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外) Cnos_X w/o n+ unreactive (Fish chronic) 0.26 (0.020～ 3.3) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外) narcotic group (Fish chronic) 0.28 (0.023～ 3.2) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	急性	2.2	**使用不可** Baseline narcotics 4.7963 (1.770 ～ 12.995) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 4.57	**使用不可** narcotic group (Daphnid acute) 3.1 (0.47～ 21) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	実測データなし		**使用可** Neutral Organics 0.615	**使用不可** No applicable results
		藻類	急性	4.3	**使用不可** Baseline narcotics 4.59 (0.54 ～ 39.3) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Neutral Organics 5.49	**使用不可** narcotic group (Alga acute) 6.7 (0.82～ 54) ※F: 判定不能(部分構造適用範囲外)
			慢性	1.3		**使用可** Neutral Organics 1.86	**使用不可** No applicable results

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L) 試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6
32	N, Nージメチルベンジルアミン CAS RN **103-83-3** 備考: MW 135.21 水溶解度(mg/L) ※1 12000 logP(Kow Win) ※1 1.75 logBCFmaxtox ※2 1.3E+0 LUMO(eV) ※3 4.05E-1 ～6.18E-1  CN(C)Cc1ccccc1	魚類	急性	24	**使用可** Narcotic amines 50.0815 (15.688 ～ 159.879)	**使用可** Aliphatic Amines 38.12	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< aliphatic 63 (4.7～ 840)
			慢性	実測データなし		**使用可** Aliphatic Amines 2.43	**使用不可** No applicable results
		甲殻類	急性	69	**使用不可** reactive unspecified <=157.5979 (59.245 ～ 419.229) 判定不能(minimum toxicity)	**使用可** Aliphatic Amines 4.41	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< aliphatic 43 (13～ 140)
			慢性	0.789		**使用可** Aliphatic Amines 0.352	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 1.2 (0.069～ 21)
		藻類	急性	1.4	**使用不可** Narcotic Amines 15.5 (2.16 ～ 111) ※D: 判定不能(適用範囲外)	**使用可** Aliphatic Amines 3.86	**使用不可** No applicable results
			慢性	0.4		**使用可** Aliphatic Amines 1.25	**使用可** CN_X amine unreactive NH, N< 1.7 (0.030～ 95)

#	化学物質	対象	急性/慢性	毒性値(mg/L)			
				試験結果	TIMES ※4	ECOSAR ※5	KATE ※6

有害性クラス判定

QSARクラス複数該当の場合は、下記順番で条件に合う値（〇印付記）を用いて評価.ただし、水溶解度実測値が得られている場合のみ評価.（水又魚類培地への溶解度は、両方得られている場合は 魚類培地への溶解度を優先）

・※P,※F,※D,※N(判定不能)が無いクラスの予測結果
・※f（判定留意)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
・より予測値が小さいクラスの予測結果

予測結果の信頼性の低い以下のクラスは判定不能とした。

判定不能(信頼性の低いクラス)

・KATE：Unclassified

判定不能（minimum toxicity）

・TIMES：Reactive Unspecified
・ECOSAR：Baseline toxicity, Baseline toxicity(Acid)

minimum toxicityの予測値は、単純な非極性麻酔作用モデル（TIMESではbasesurface narcotics、ECOSARではNeutral Organics、NeutralOrganics（acid））のQSAR式により算出したものである。この値よりも有意に高い毒性があるかどうかは、類似構造を持つ化学物質による試験 データがないため不明である。（TIMESでは毒性値の最大値を算出している）

（※Baseline toxicity(acid)クラスの予測値は物質のイオン化による毒性の減少に鑑み、Baseline toxicityの予測結果を調整係数10で除した値である）

ECOSARでは各QSAR式の定める最大logP値を超える場合「飽和状態で影響なし」としているため、「有害性クラス外相当」とする。

※1 KowWin v1.68により算出

※2～4 TIMES v2.30.1.11 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. 藻類エンドポイント: Algae Acute toxicity.

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 orbita l

BCFmaxtox : the maximum bioconcentration factor

※5 ECOSAR v2.00により算出. 魚類急性エンドポイント: Fish 96h LC50. 甲殻類急性エンドポイント: Daphnid 48h LC50. 藻類急性エンドポイント: Green Algae 96h EC50. 魚類慢性エンドポイント : ChV. 甲殻類慢性エンドポイント: ChV. 藻類慢性エンドポイント : ChV. logPはKowWin※1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。~~

※6 KATE2020 v2.0により算出. 魚類急性エンドポイント: Fish 96h LC50. 甲殻類急性エンドポイント: Daphnid 48h EC50. 藻類急性エンドポイント: Alga 72h EC50.魚類慢性エンドポイント: 胚及び孵化後30d NOEC. 甲殻類慢性エンドポイント: 21d NOEC. 藻類慢性エンドポイント: 72h NOEC. logPはKowWin※1を使用.

R^2>=0.7, Q^2>=0.5, n>=5のデータを使用。使用できるデータがない場合、"No applicable results"と表示した。

TIMES及びKATEでは予測値を「予測値（95%信頼区間）」で表している。

※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＞

※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。ただし、予測物質のlogPはSuuport Chemicals*と参照物質を合わせた全物質のlogPの最大値･最小値の内側に存在する。＜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＞

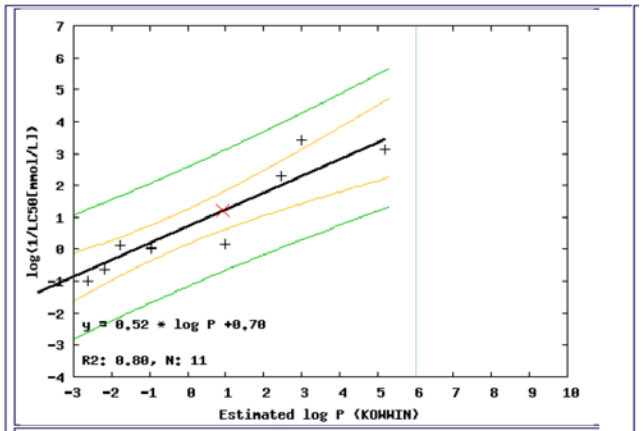
＊ KATE2020では ① logP推定値>6.0の化学物質データ ② 不等号付きデータ ③ 外れ値 をSuuport Chemicalsとして参考情報扱いとし、QSARモデル構築には使用していない。

KATE QSARクラスの詳細情報（Verify QSAR画面抜粋）

No.1-1　［２－ヒドロキシ－Ｎ，Ｎ－ビス（２－ヒドロキシエチル）－Ｎ－メチルエタン－１－アミニウムC10脂肪酸モノエステル　メチルサルフェート

魚類急性

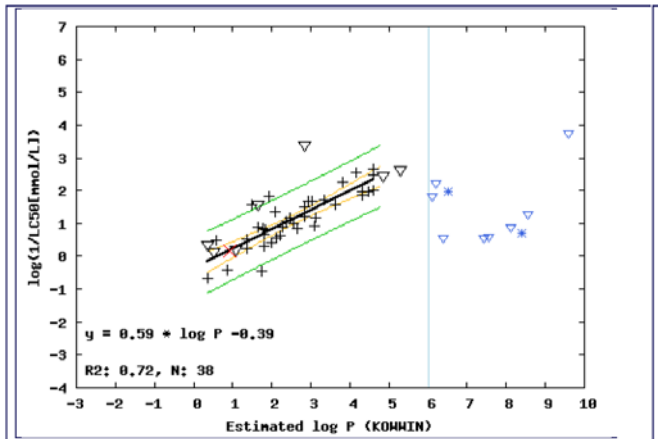
n+, N+



Predicted Toxicity [mg/L]: 20
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.26, 1600]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P +0.70	11	1	[-3.91, 5.18]	0.80	0.69	0.72

COS_X ester unreactive

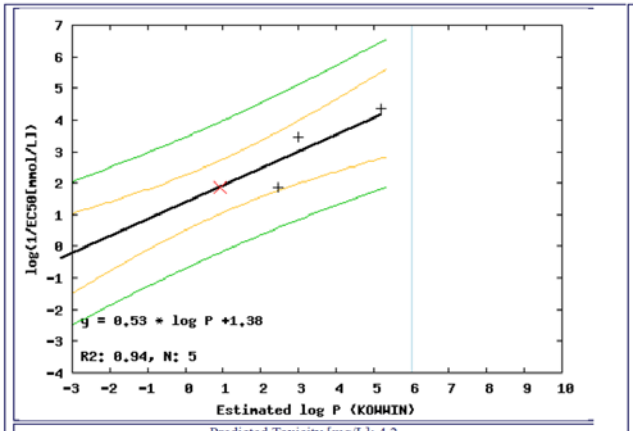


Predicted Toxicity [mg/L]: 220
95% Prediction Interval [mg/L]: [26, 1800]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.59 * log P -0.39	38	21	[0.37, 4.61]	0.72	0.68	0.43

甲殻類急性

n+, N+



Predicted Toxicity [mg/L]: 4.2
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.036, 500]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.53 * log P +1.38	5	0	[-3.29, 5.18]	0.94	0.88	0.46

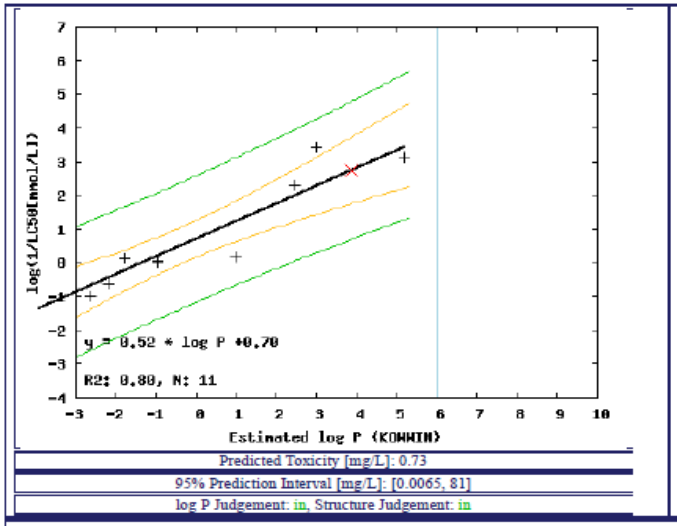
凡例

×: Query chemical
＋: Reference chemical
——: Regression line
——: 95% confidence interval for the regression line
——: 95% prediction interval for log(1/LC50, EC50, or NOEC)
----Support Data----
*: Support chemical with log P>6.0
▽△: Data with "<" or ">"
◇: Outlier

No.1-2　［２－ヒドロキシ－N，Ｎ－ビス（２－ヒドロキシエチル）－Ｎ－メチルエタン－１－アミニウムC16脂肪酸モノエステル　メチルサルフェート

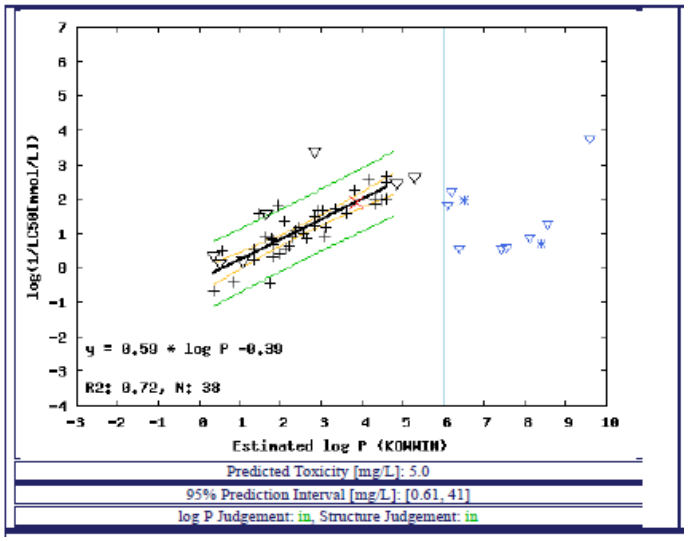
魚類急性

n+, N+



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P +0.70	11	1	[-3.91, 5.18]	0.80	0.69	0.72

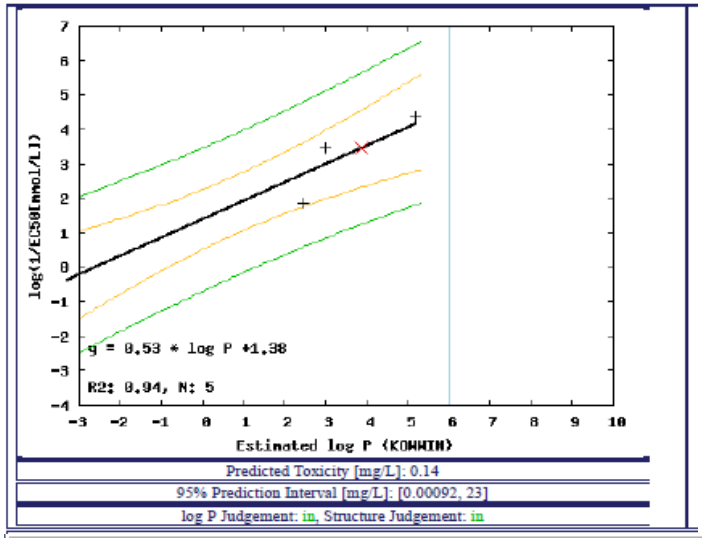
COS_X ester unreactive



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.59 * log P -0.39	38	21	[0.37, 4.61]	0.72	0.68	0.43

甲殻類急性

n+, N+

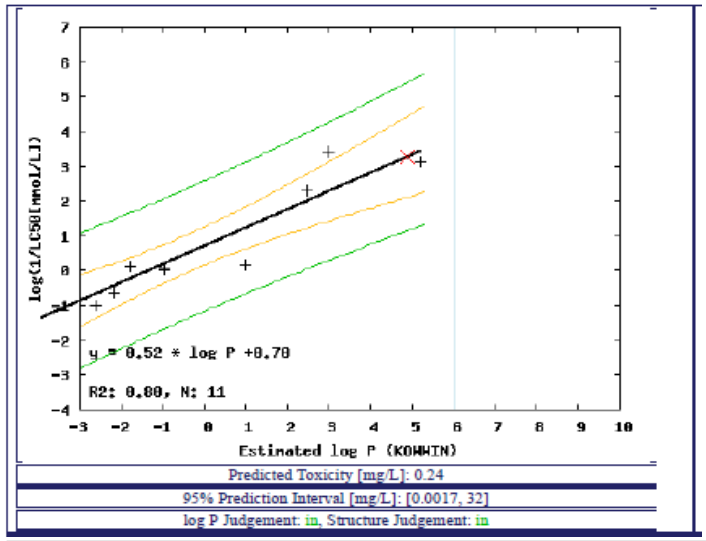


Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.53 * log P +1.38	5	0	[-3.29, 5.18]	0.94	0.88	0.46

No.1-3　　［２－ヒドロキシ－N，Ｎ－ビス（２－ヒドロキシエチル）－Ｎ－メチルエタン－１－アミニウムC18脂肪酸モノエステル　メチルサルフェート

魚類急性

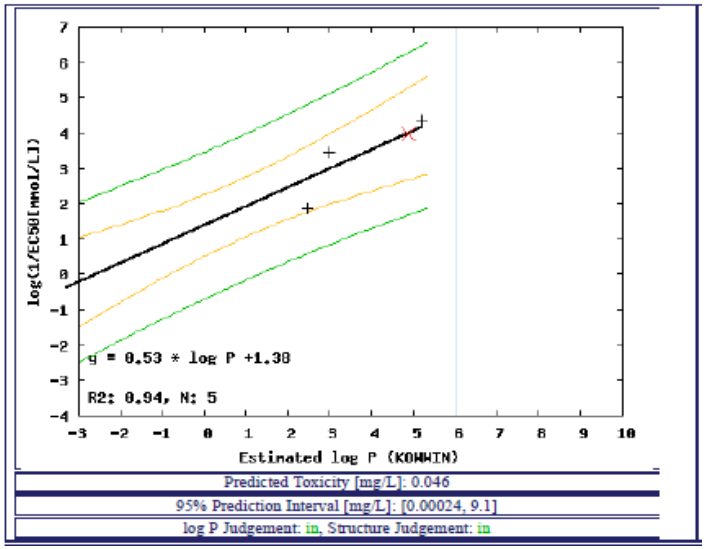
n+, N+



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P +0.70	11	1	[-3.91, 5.18]	0.80	0.69	0.72

甲殻類急性

n+, N+

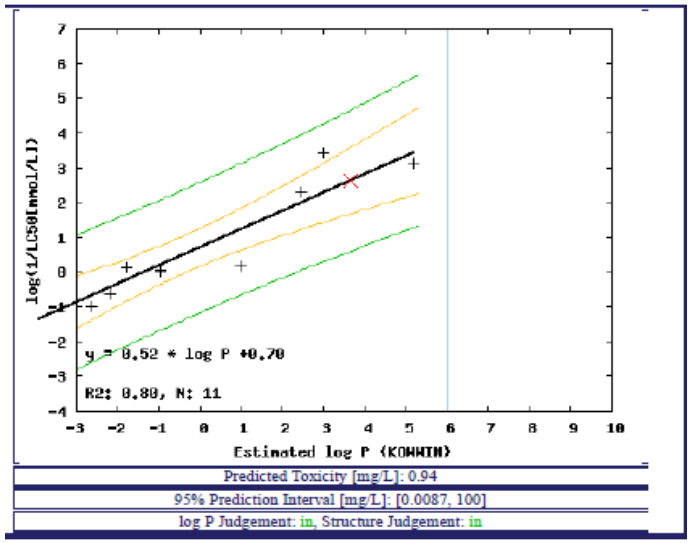


Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.53 * log P +1.38	5	0	[-3.29, 5.18]	0.94	0.88	0.46

No.1-5　［２－ヒドロキシ－Ｎ，Ｎ－ビス（２－ヒドロキシエチル）－Ｎ－メチルエタン－１－アミニウムC16:1(Δ9)脂肪酸モノエステル　メチルサルフェート

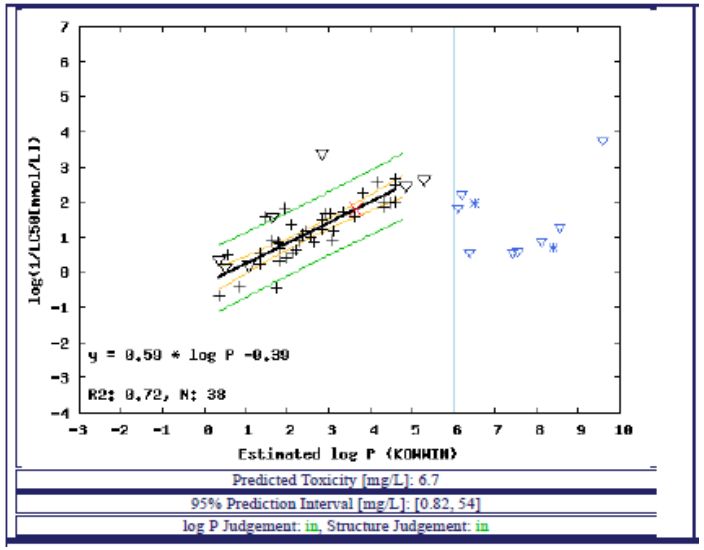
魚類急性

n+, N+



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P +0.70	11	1	[-3.91, 5.18]	0.80	0.69	0.72

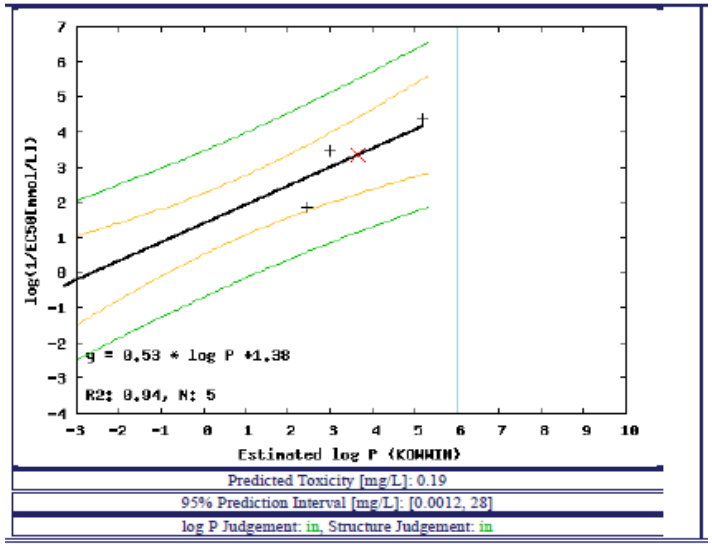
COS X ester unreactive



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.59 * log P -0.39	38	21	[0.37, 4.61]	0.72	0.68	0.43

甲殻類急性

n+, N+

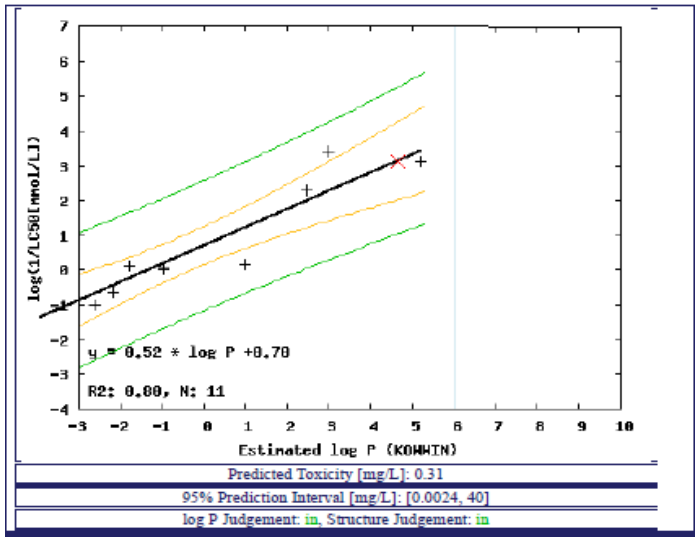


Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.53 * log P +1.38	5	0	[-3.29, 5.18]	0.94	0.88	0.46

No.1-6　　［２－ヒドロキシ－Ｎ，Ｎ－ビス（２－ヒドロキシエチル）－Ｎ－メチルエタン－１－アミニウムC18:1(Δ9)脂肪酸モノエステル　メチルサルフェート

魚類急性

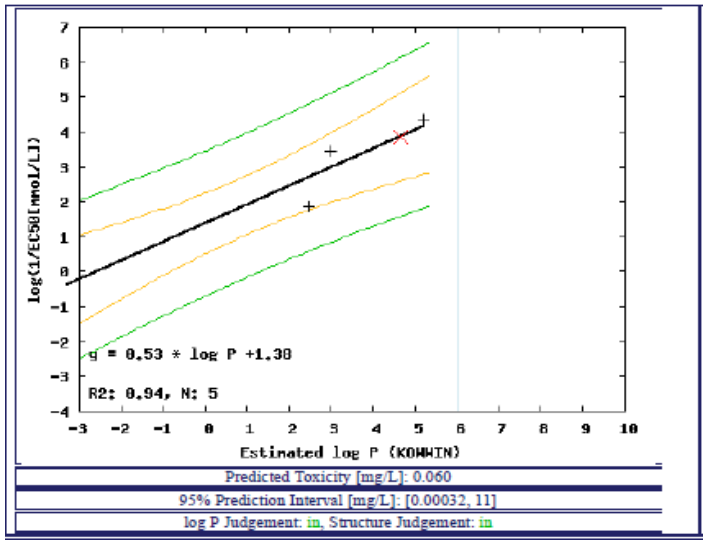
n+, N+



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P +0.70	11	1	[-3.91, 5.18]	0.80	0.69	0.72

甲殻類急性

n+, N+

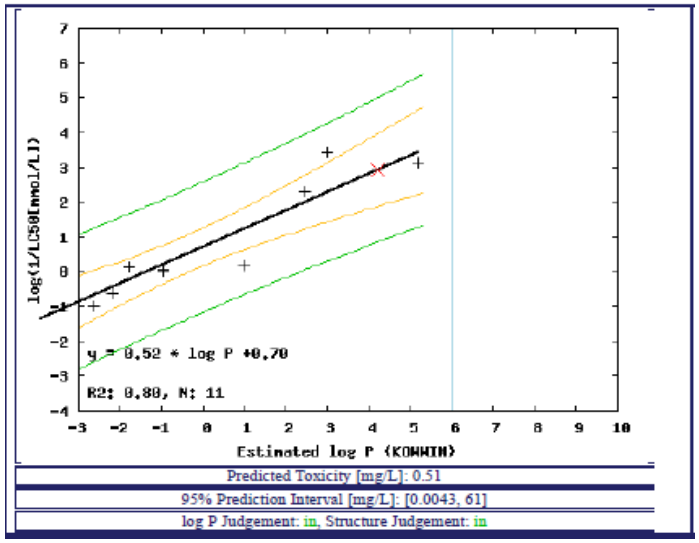


Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.53 * log P +1.38	5	0	[-3.29, 5.18]	0.94	0.88	0.46

No.1-7　［２－ヒドロキシ－N，Ｎ－ビス（２－ヒドロキシエチル）－N－メチルエタン－１－アミニウムC18:3(Δ9,12,15)脂肪酸モノエステル メチルサルフェート

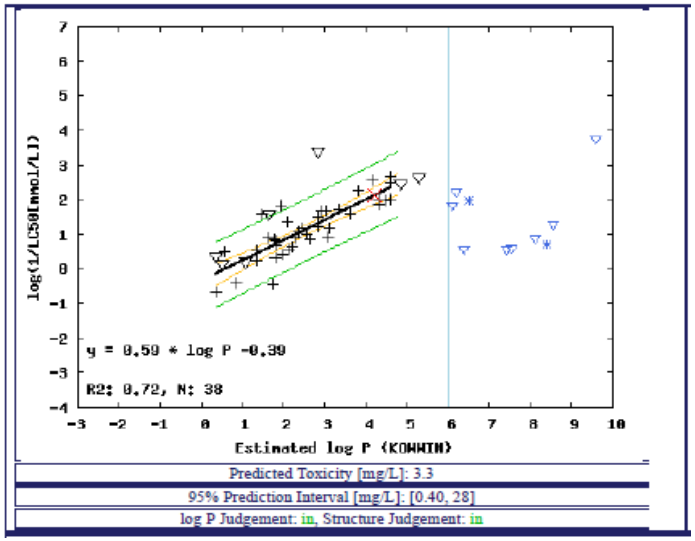
魚類急性

n+, N+



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P +0.70	11	1	[-3.91, 5.18]	0.80	0.69	0.72

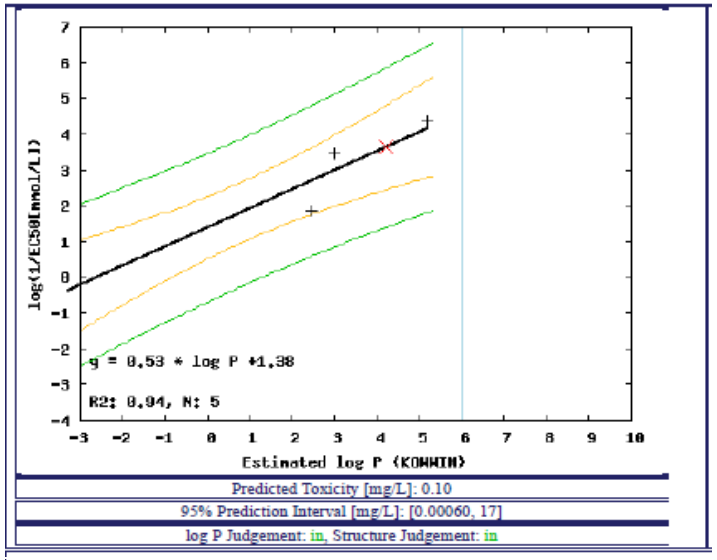
COS_X ester unreactive



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.59 * log P -0.39	38	21	[0.37, 4.61]	0.72	0.68	0.43

甲殻類急性

n+, N+

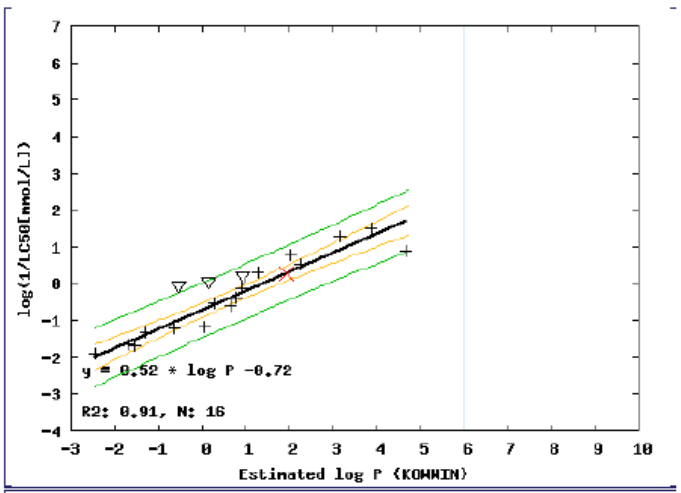


Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.53 * log P +1.38	5	0	[-3.29, 5.18]	0.94	0.88	0.46

No.2-1　　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C8アミン(EO鎖A,EO鎖B):(1,1)

魚類急性

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic

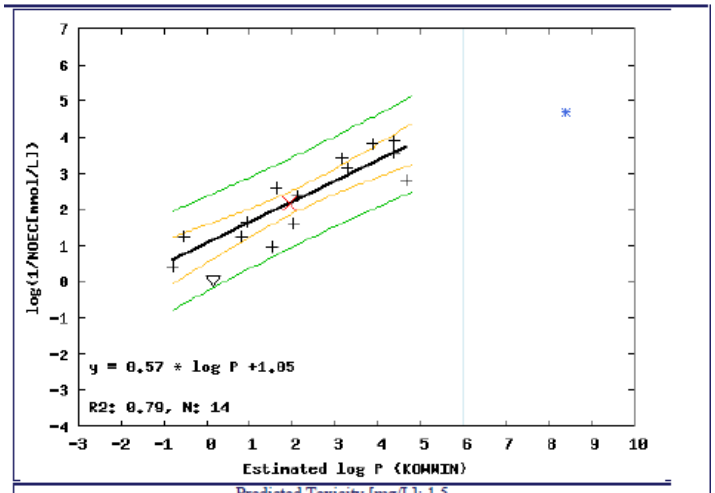


Predicted Toxicity [mg/L]: 120
95% Prediction Interval [mg/L]: [20, 650]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<

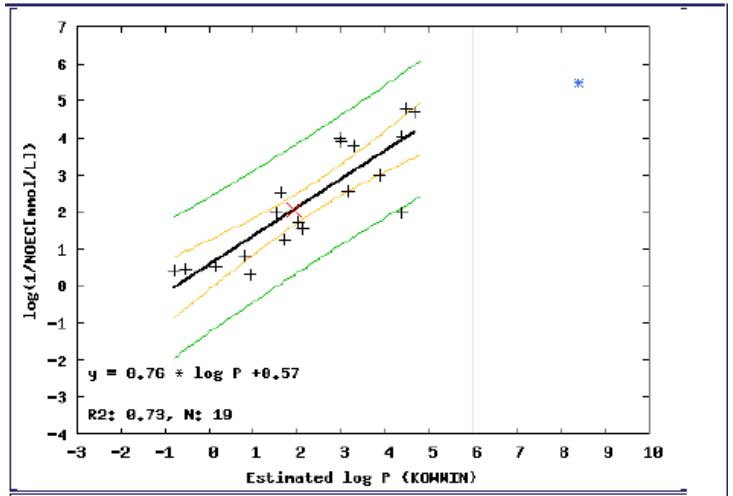


Predicted Toxicity [mg/L]: 1.5
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.087, 26]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

藻類慢性

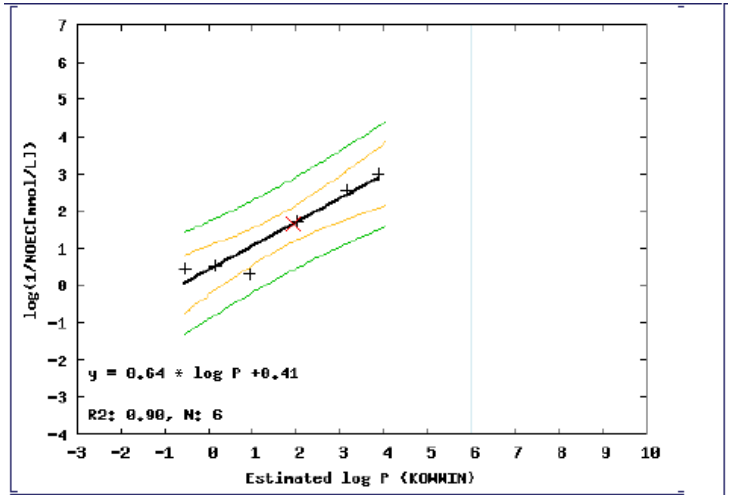
CN_X amine unreactive NH, N<



Predicted Toxicity [mg/L]: 2.0
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.035, 110]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



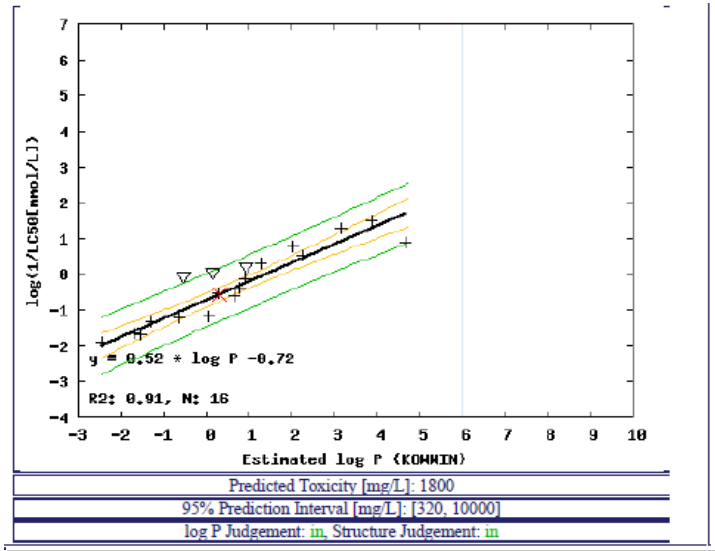
Predicted Toxicity [mg/L]: 4.9
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.29, 83]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.64 * log P +0.41	6	0	[-0.56, 3.87]	0.90	0.79	0.33

No.2-2　　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C8アミン(EO鎖A,EO鎖B):(4,4)

魚類急性

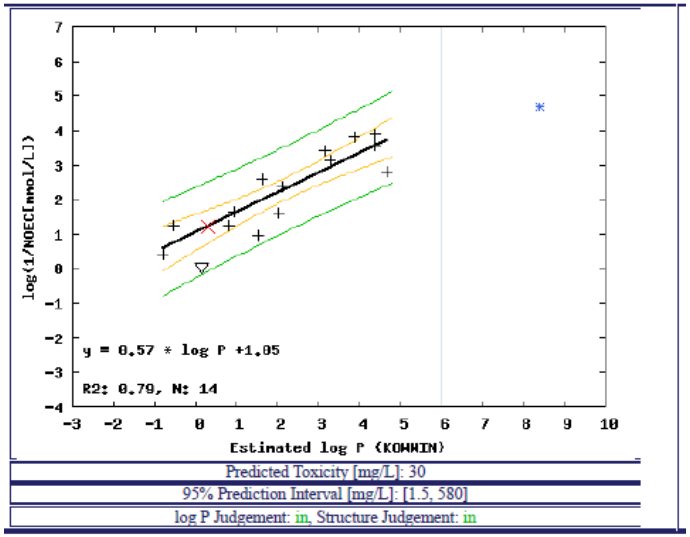
CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

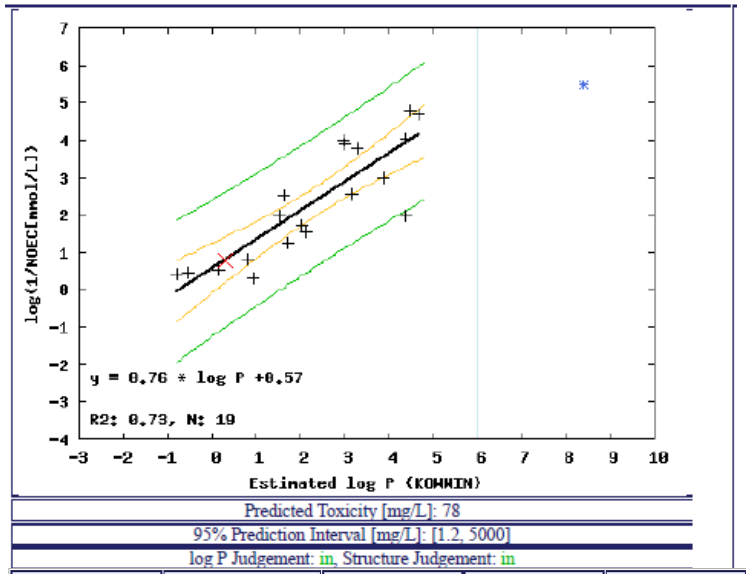
CN_X amine unreactive NH, N<



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

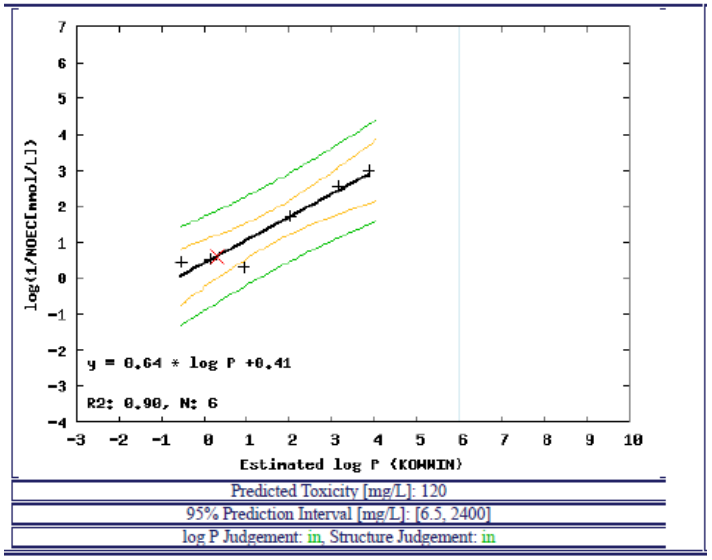
藻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic

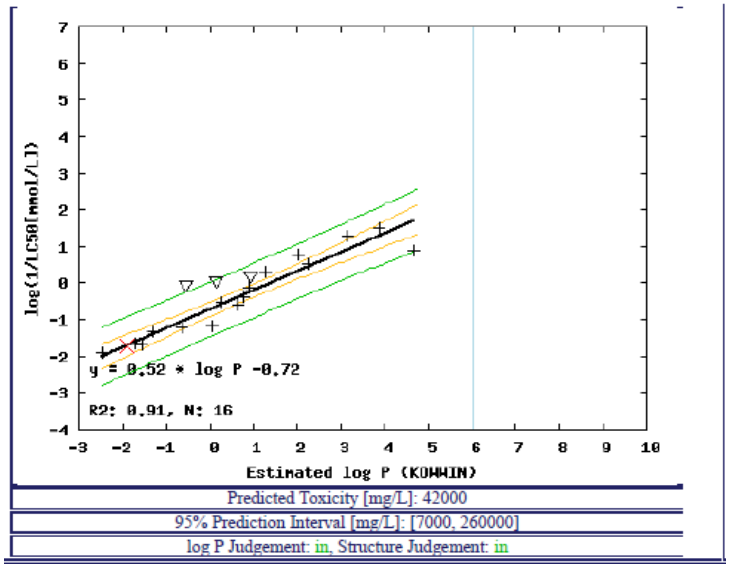


Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.64 * log P +0.41	6	0	[-0.56, 3.87]	0.90	0.79	0.33

No.2-3　　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C8アミン(EO鎖A,EO鎖B):(8,8)

魚類急性

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic

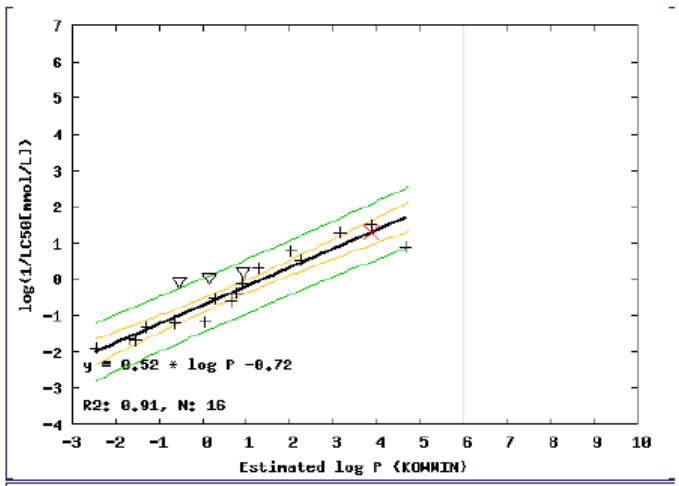


Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

No.2-4　　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C12アミン(EO鎖A,EO鎖B):(1,1)

魚類急性

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic

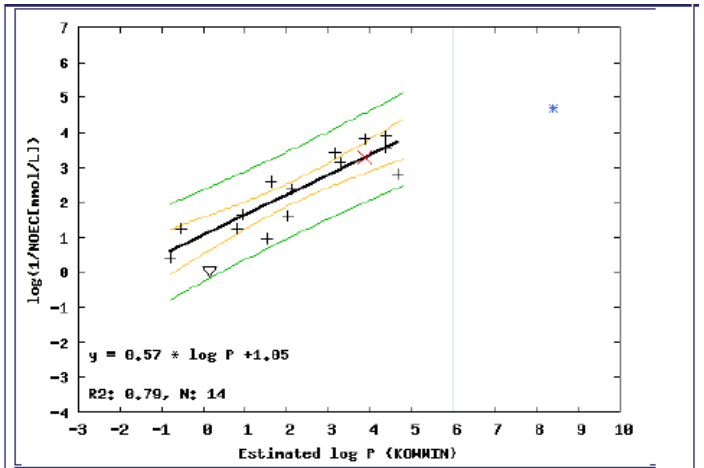


Predicted Toxicity [mg/L]: 14
95% Prediction Interval [mg/L]: [2.3, 89]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<

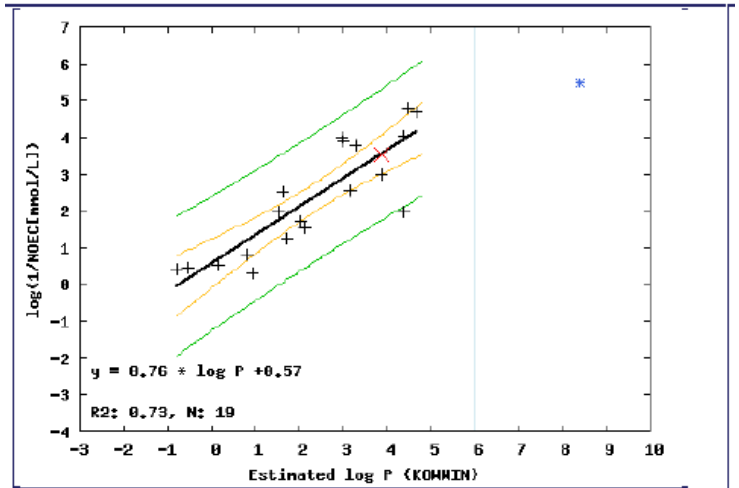


Predicted Toxicity [mg/L]: 0.14
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.0077, 2.7]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

藻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<



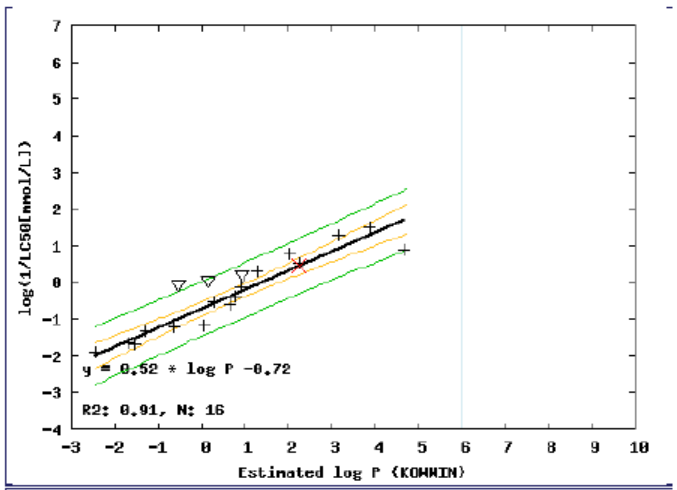
Predicted Toxicity [mg/L]: 0.079
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.0013, 4.8]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

No.2-5　　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C12アミン(EO鎖A,EO鎖B):(4,4)

魚類急性

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic

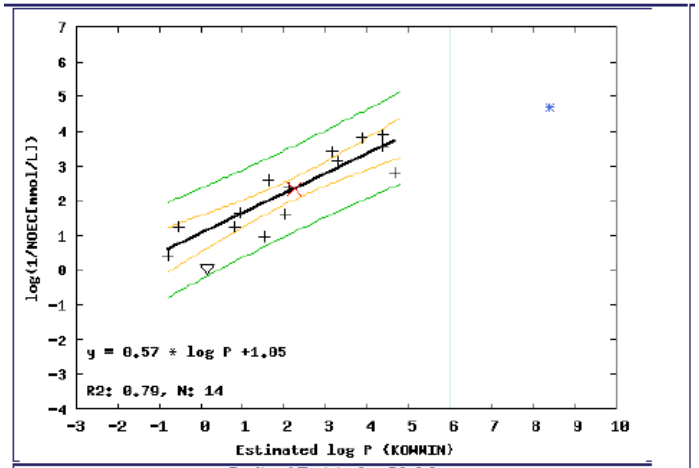


Predicted Toxicity [mg/L]: 200
95% Prediction Interval [mg/L]: [34, 1100]

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<

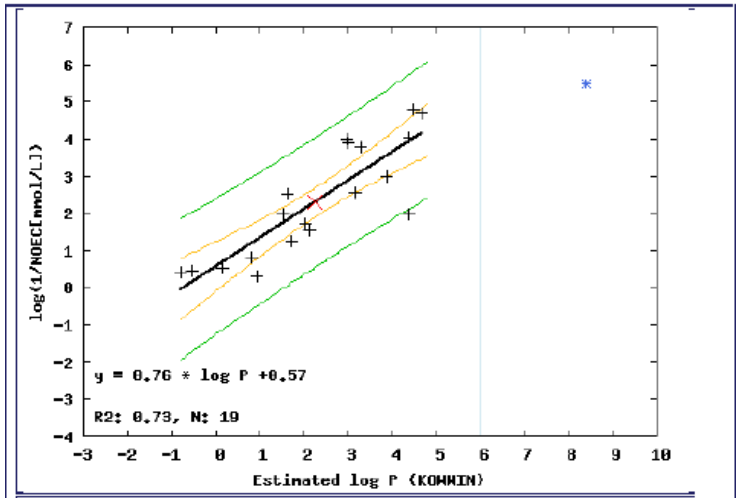


Predicted Toxicity [mg/L]: 2.5
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.14, 43]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

藻類慢性

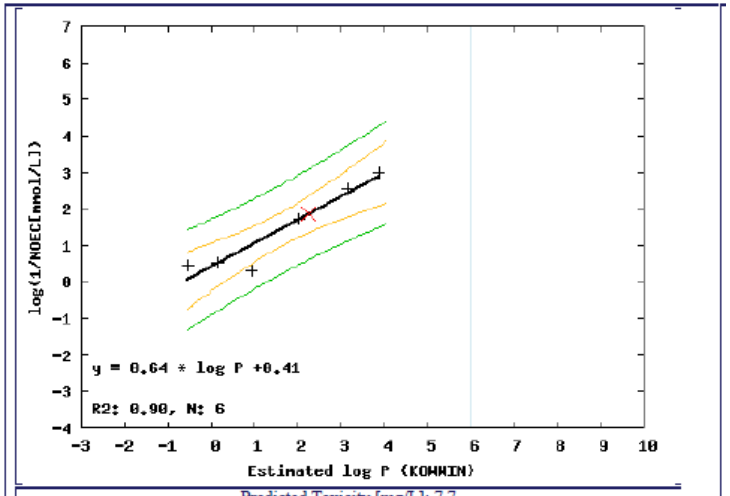
CN_X amine unreactive NH, N<



Predicted Toxicity [mg/L]: 2.8
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.050, 150]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



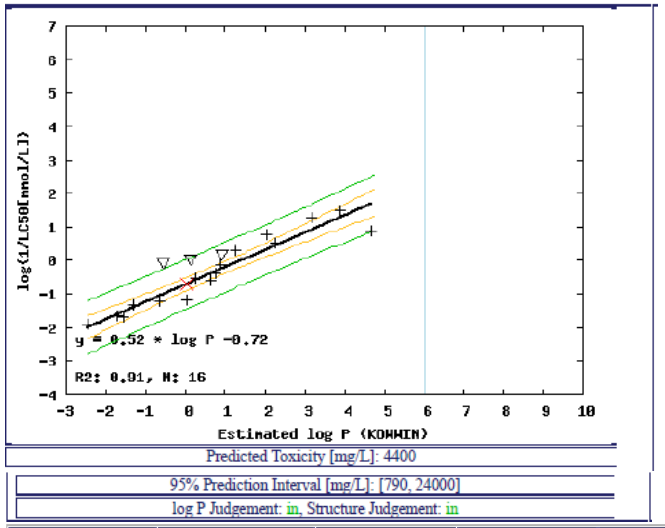
Predicted Toxicity [mg/L]: 7.7
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.44, 130]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.64 * log P +0.41	6	0	[-0.56, 3.87]	0.90	0.79	0.33

No.2-6　　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C12アミン(EO鎖A,EO鎖B):(8,8)

魚類急性

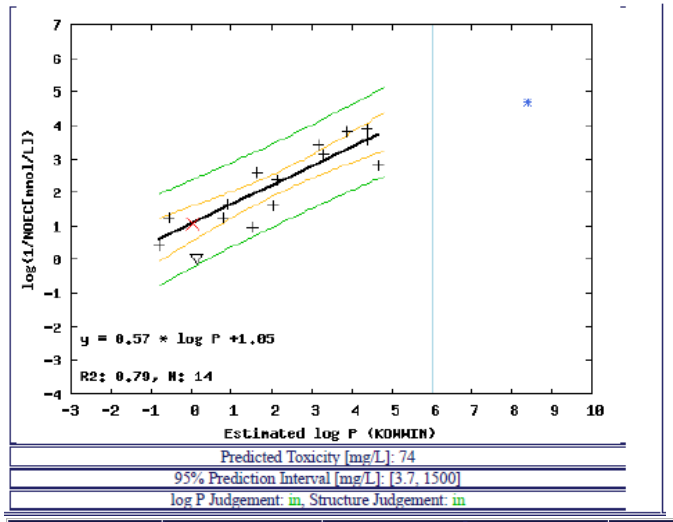
CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

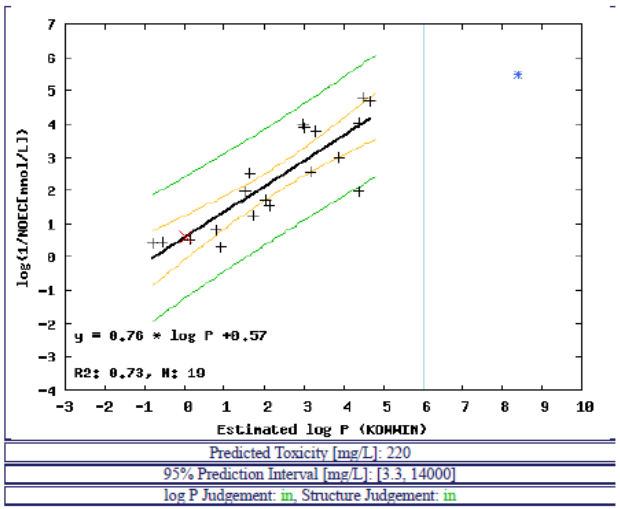
CN_X amine unreactive NH, N<



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

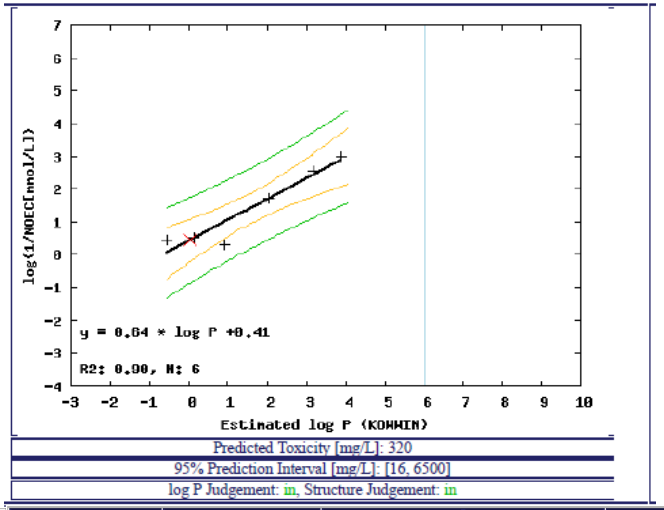
藻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic

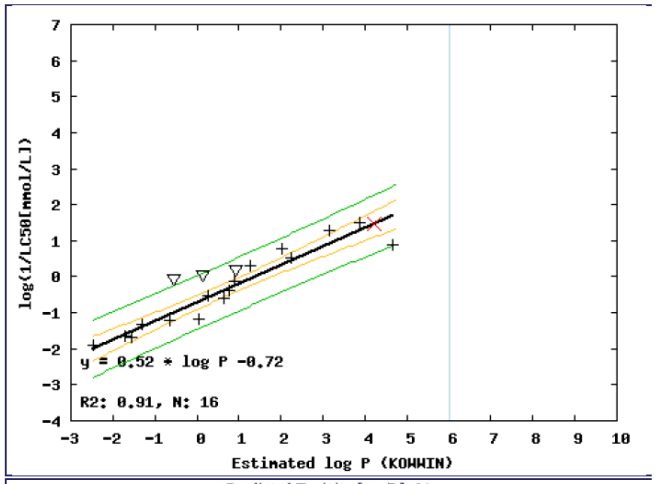


Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.64 * log P +0.41	6	0	[-0.56, 3.87]	0.90	0.79	0.33

No.2-9　　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C16アミン(EO鎖A,EO鎖B):(4,4)

魚類急性

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



Predicted Toxicity [mg/L]: 21

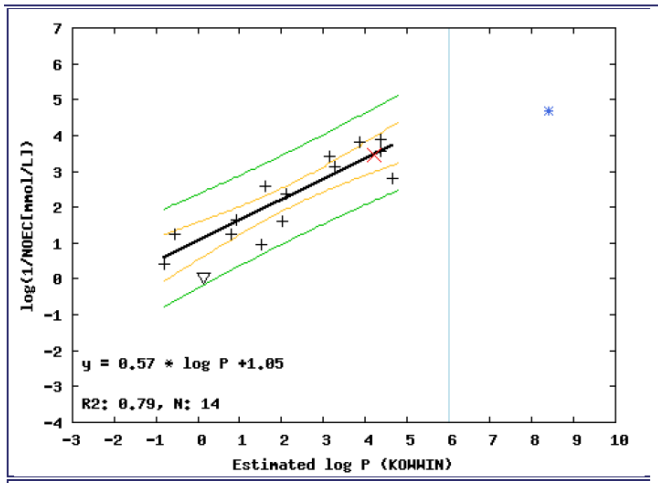
95% Prediction Interval [mg/L]: [3.3, 130]

log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<



Predicted Toxicity [mg/L]: 0.20

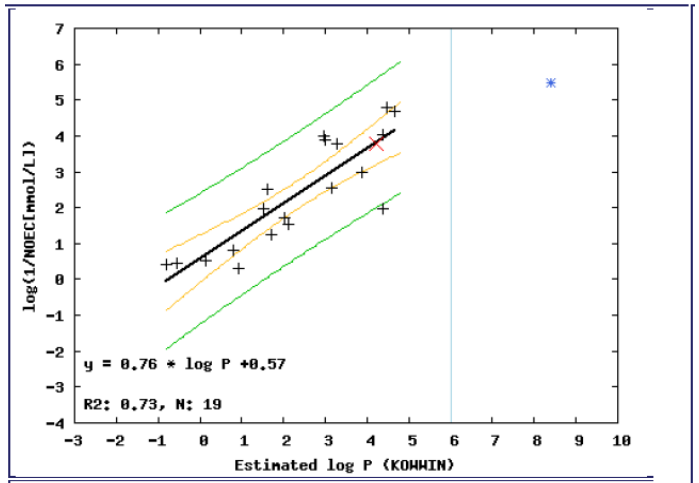
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.010, 4.0]

log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

藻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<



Predicted Toxicity [mg/L]: 0.096

95% Prediction Interval [mg/L]: [0.0015, 6.1]

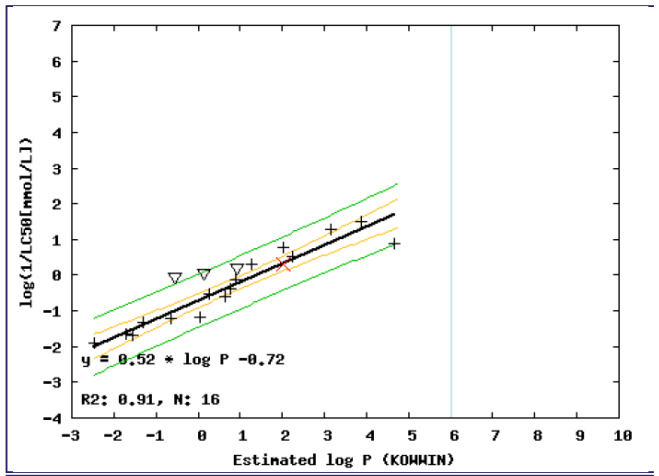
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

No.2-10　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C16アミン(EO鎖A,EO鎖B):(8,8)

魚類急性

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic

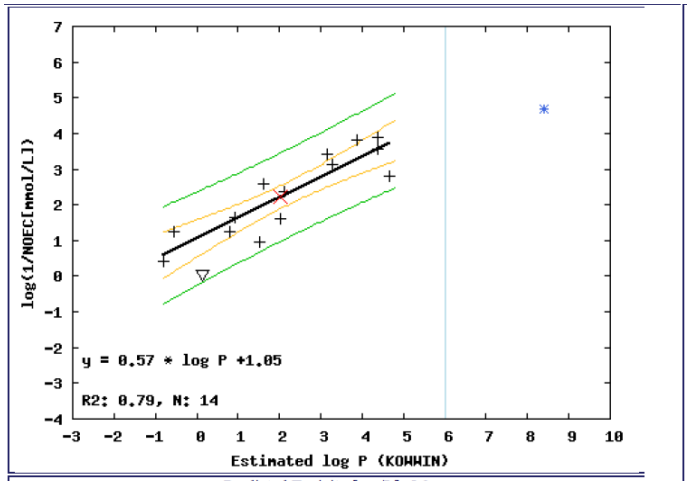


Predicted Toxicity [mg/L]: 450
95% Prediction Interval [mg/L]: [80, 2600]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<

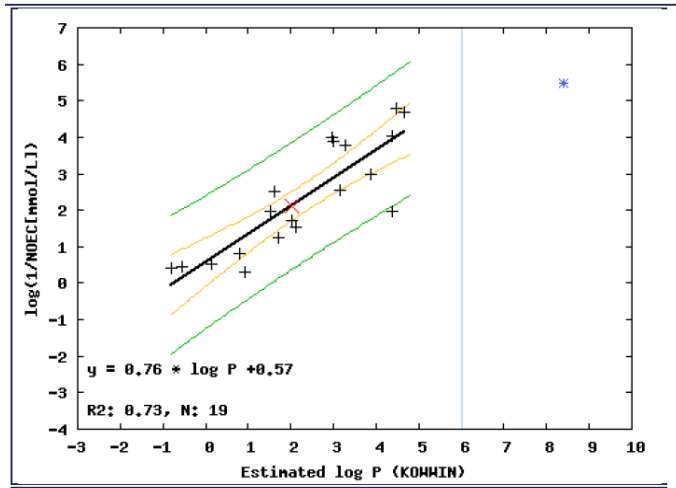


Predicted Toxicity [mg/L]: 5.9
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.34, 100]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

藻類慢性

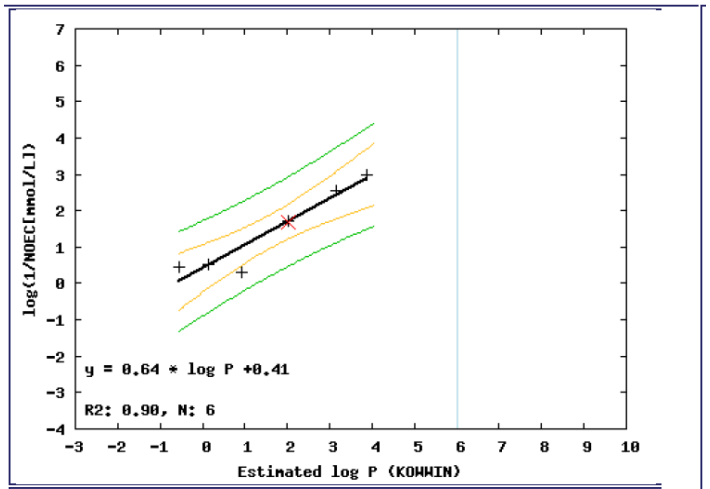
CN_X amine unreactive NH, N<



Predicted Toxicity [mg/L]: 7.3
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.13, 400]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



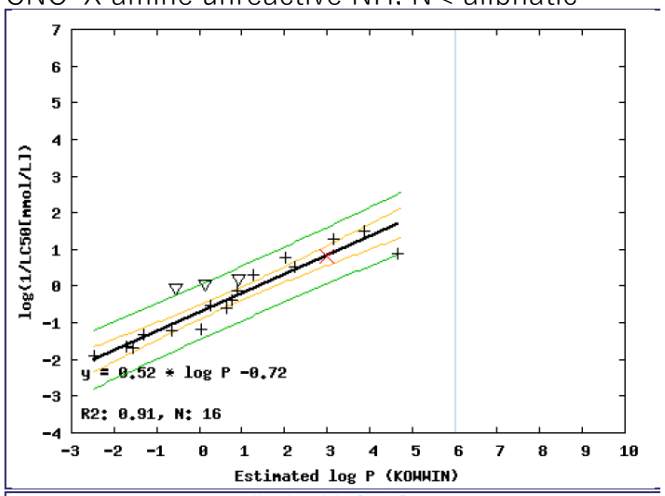
Predicted Toxicity [mg/L]: 19
95% Prediction Interval [mg/L]: [1.1, 320]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.64 * log P +0.41	6	0	[-0.56, 3.87]	0.90	0.79	0.33

No.2-13　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C18アミン(EO鎖A,EO鎖B):(8,8)

魚類急性

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic

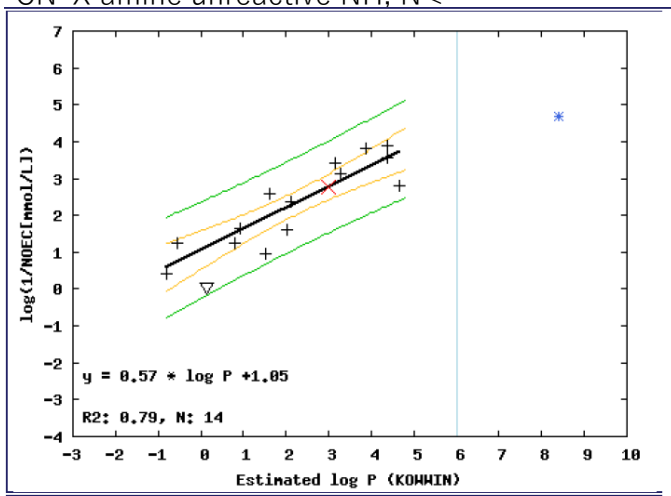


Predicted Toxicity [mg/L]: 140
95% Prediction Interval [mg/L]: [25, 860]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<

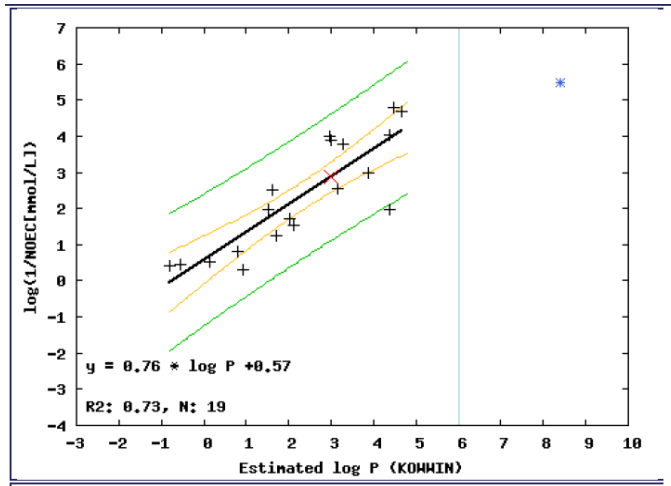


Predicted Toxicity [mg/L]: 1.7
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.094, 29]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

藻類慢性

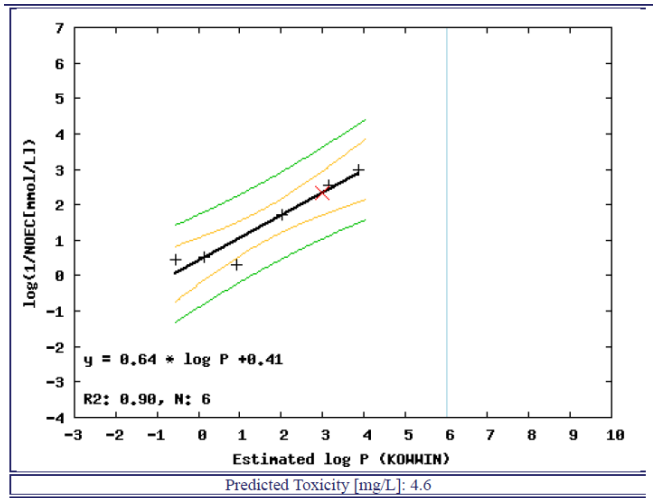
CN_X amine unreactive NH, N<



Predicted Toxicity [mg/L]: 1.3
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.024, 75]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



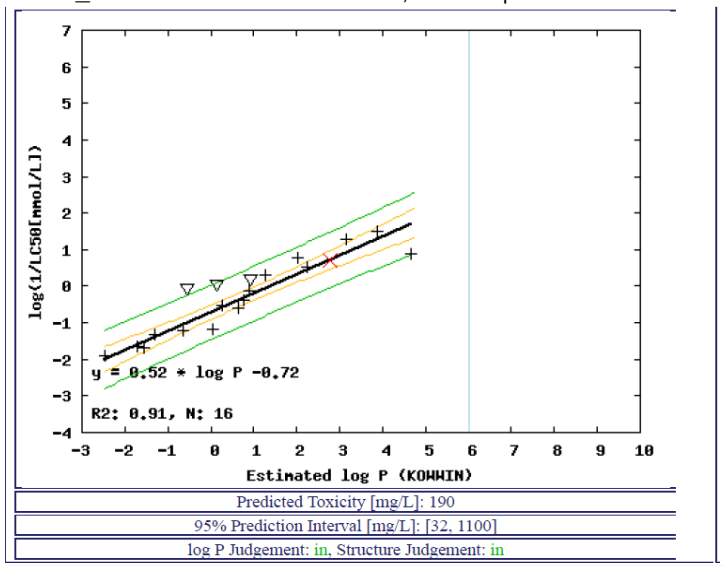
Predicted Toxicity [mg/L]: 4.6
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.24, 90]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.64 * log P +0.41	6	0	[-0.56, 3.87]	0.90	0.79	0.33

No.2-16　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C18:1(Δ9)アミン(EO鎖A,EO鎖B):(8,8)

魚類急性

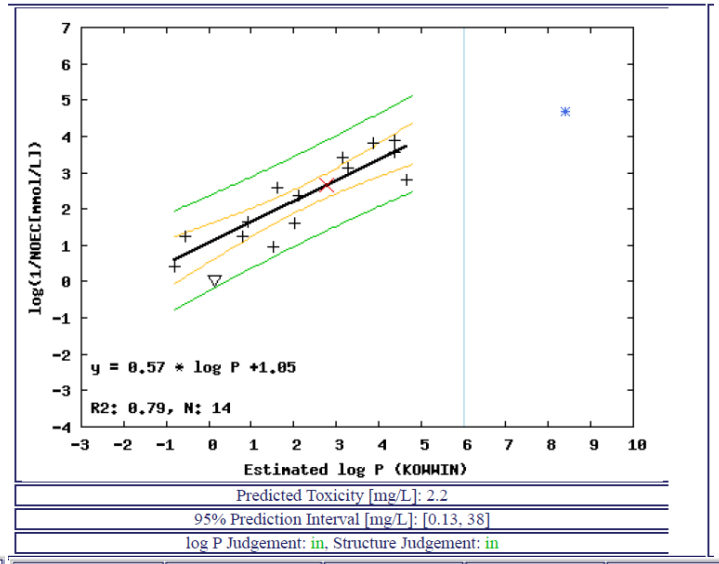
CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

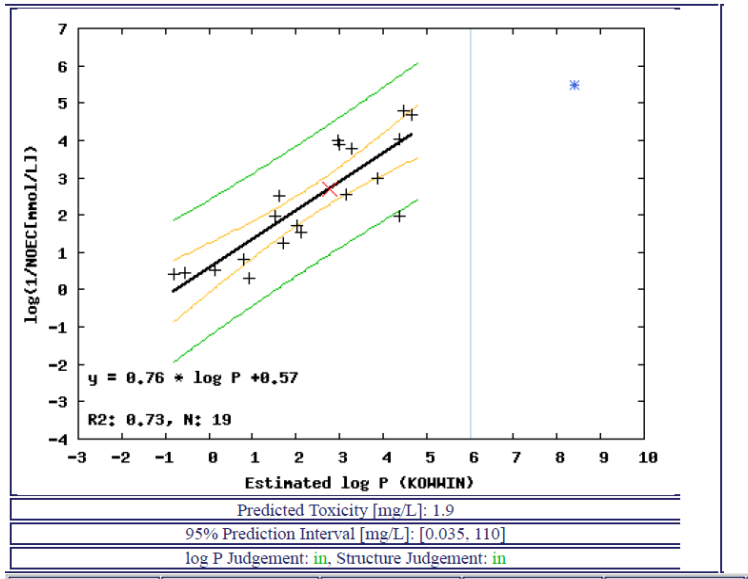
CN_X amine unreactive NH, N<



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

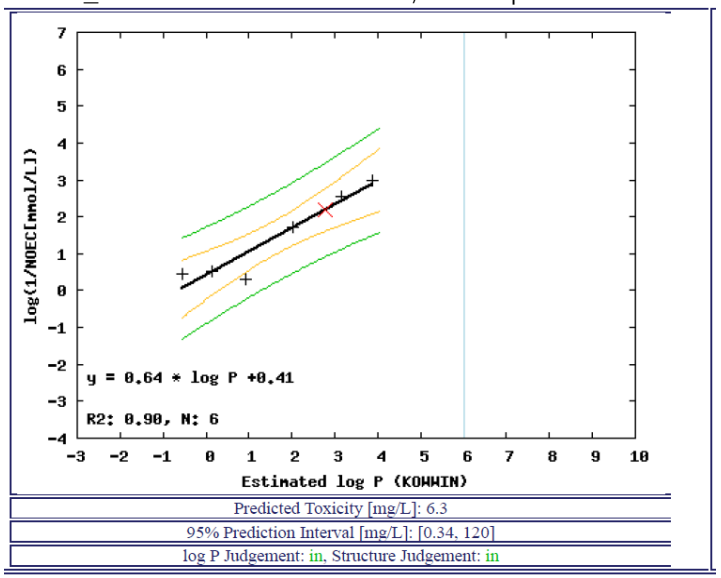
藻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<



Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic

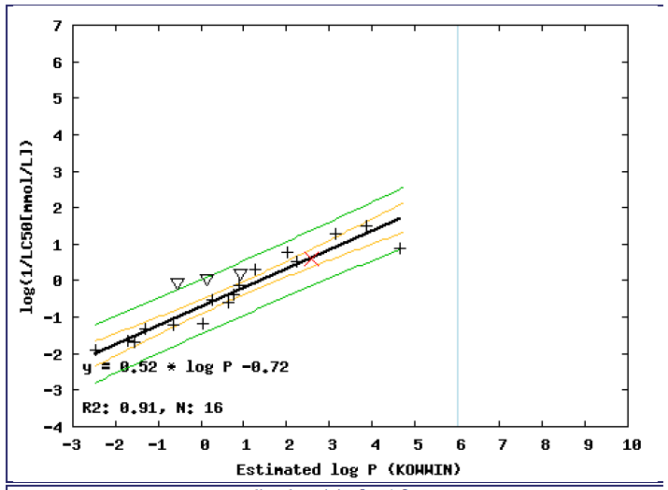


Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.64 * log P +0.41	6	0	[-0.56, 3.87]	0.90	0.79	0.33

No.2-19　N，N－ジポリオキシエチレン－N－C18:2(Δ9,12)アミン(EO鎖A,EO鎖B):(8,8)

魚類急性

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



Predicted Toxicity [mg/L]: 240

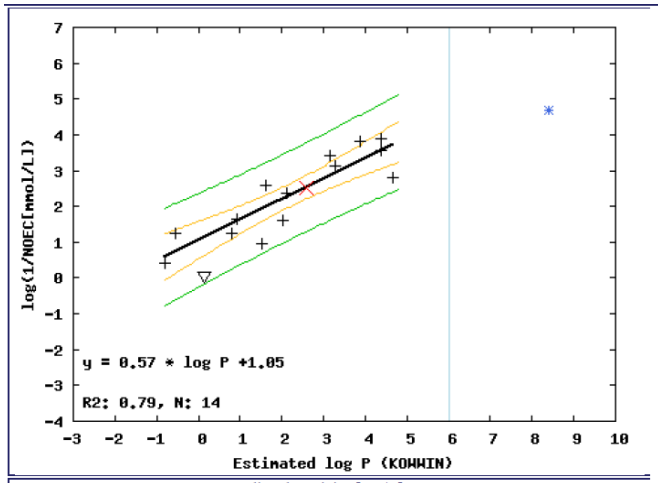
95% Prediction Interval [mg/L]: [42, 1400]

log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.52 * log P -0.72	16	3	[-2.48, 4.67]	0.91	0.87	0.31

甲殻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<



Predicted Toxicity [mg/L]: 2.9

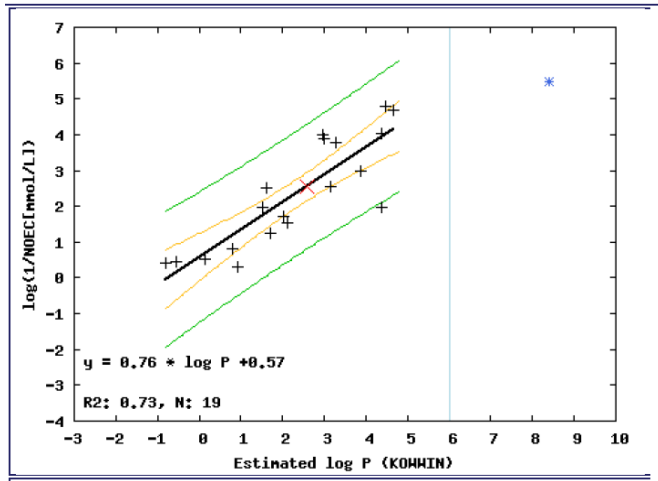
95% Prediction Interval [mg/L]: [0.17, 51]

log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.57 * log P +1.05	14	2	[-0.80, 4.67]	0.79	0.71	0.51

藻類慢性

CN_X amine unreactive NH, N<



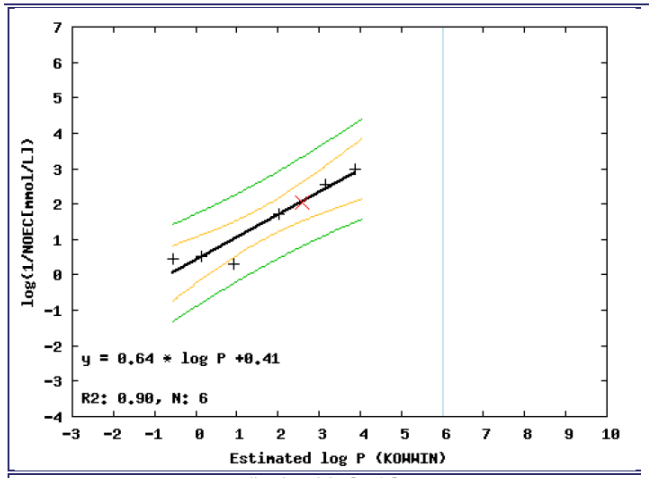
Predicted Toxicity [mg/L]: 2.8

95% Prediction Interval [mg/L]: [0.051, 160]

log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.76 * log P +0.57	19	1	[-0.80, 4.67]	0.73	0.67	0.76

CNO_X amine unreactive NH, N< aliphatic



Predicted Toxicity [mg/L]: 8.6

95% Prediction Interval [mg/L]: [0.48, 160]

log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Equation	Number of Chemicals used for Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R^2	Q^2	RMSE
y = 0.64 * log P +0.41	6	0	[-0.56, 3.87]	0.90	0.79	0.33