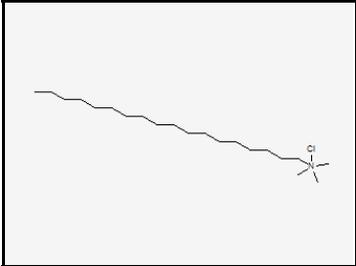
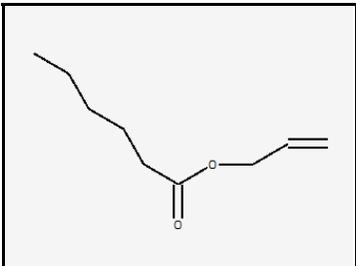
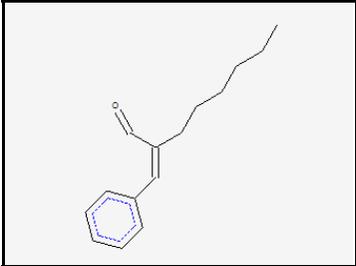
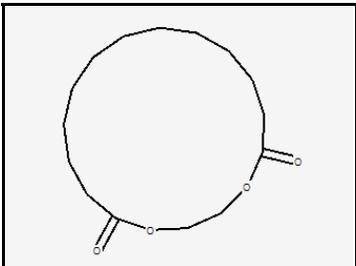
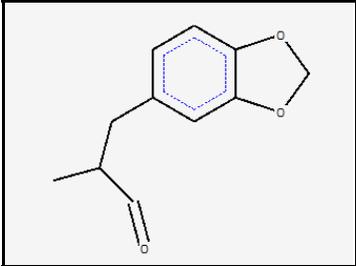
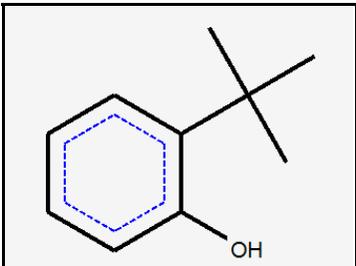
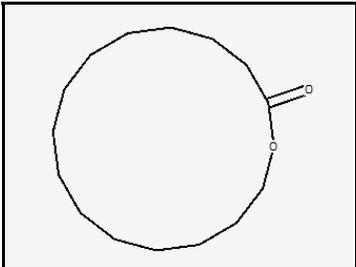
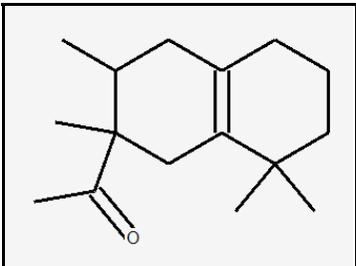


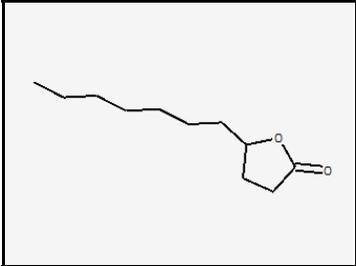
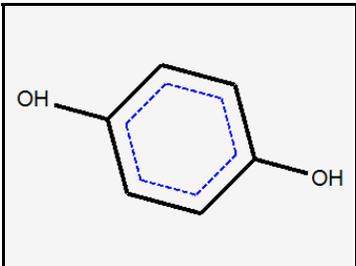


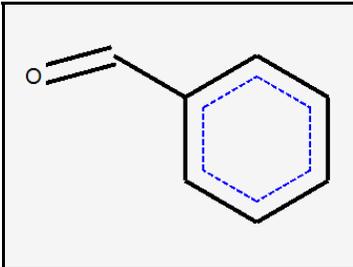
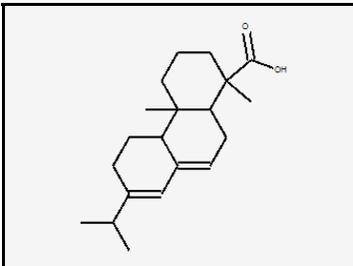
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
3	CAS番号 112-03-8 トリメチル(オクタデカン-1-イル)アンモニウムクロリド 備考: 	魚類	使用可 0.064 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 3.24 mg/L	使用不可 hydrocabons aliphatic 4.75 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 5.11 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.037 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 2.25 mg/L	使用不可 hydrocabons aliphatic 2.19 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 3.15 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			分子量 348.06 対水溶解(mg/L) [予測値] 1.759 ※1	logP(KowWin) 4.167 ※2 logBCFmaxtox ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6		
4	CAS番号 123-68-2 Allyl hexanoate 備考: 	魚類	使用可 0.117 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 11.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 4.25 mg/L ○ Vinyl/ Allyl Esters 0.725 mg/L Baseline Toxicity 11.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 1.69 mg/L
		甲殻類	使用可 2 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8.88 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 7.79 mg/L ○ Vinyl/ Allyl Esters 4.03 mg/L Baseline Toxicity 7.04 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems2 3.59 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			分子量 156.23 対水溶解(mg/L) [予測値] 136.1 ※1	logP(KowWin) 3.183 ※2 logBCFmaxtox 2.38E+0 ※3 LUMO(eV) 7.12E-1~1.16E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6		

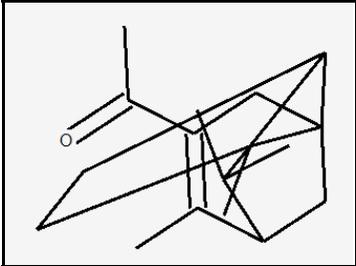
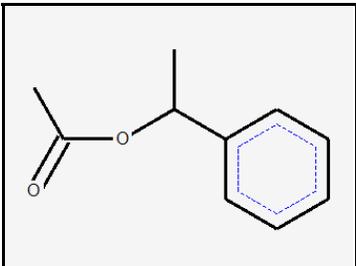
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
5	CAS番号 101-86-0  2-ベンジリデンオクタナール  備考:   分子量 216.33    logP(KowWin) 4.821 ※2 対水溶解(mg/L) 2.75 ※1    logBCFmaxtox 3.59E+0 ※3 [予測値]    LUMO(eV) ※4 ODDI 2.98E-1~2.81E-1 ※5 Qc ※6	魚類	使用可 1.7 mg/L	使用不可 aldehydes 0.503 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Vinyl/Allyl Aldehydes 0.169 mg/L Baseline Toxicity 0.520 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 0.545 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.258 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.267 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Vinyl/Allyl Aldehydes 0.621 mg/L Baseline Toxicity 0.383 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 0.368 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
6	CAS番号 105-95-3  1, 11-ウンデカンジカルボン酸エステル  備考:   分子量 270.37    logP(KowWin) 4.712 ※2 対水溶解(mg/L) 1.719 ※1    logBCFmaxtox 3.51E+0 ※3 [予測値]    LUMO(eV) 7.41E-1~1.1E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 2.13 mg/L	使用不可 esters 1.01 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 0.942 mg/L Baseline Toxicity 0.814 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 0.722 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 0.583 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 1.47 mg/L Baseline Toxicity 0.594 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 0.815 mg/L

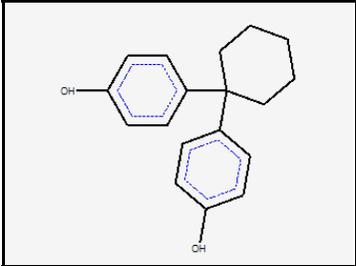
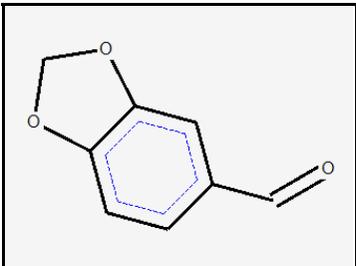
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
8	CAS番号 1205-17-0 2-メチル-3-(3,4-ジオキシフェニル)-プロパナール 備考: 	魚類	使用可 5.3 mg/L	使用不可 aldehydes 10.0 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 5.92 mg/L Benzodioxoles 112 mg/L Baseline Toxicity 54.7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 ethers with aromatic 36.6 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 68.1 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 38.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aldehydes (Mono) 7.40 mg/L ○ Benzodioxoles 0.215 mg/L Baseline Toxicity 32.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 ethers with aromatic 5.79 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 21.2 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
10	旧指定または旧2監通し番号 :993 CAS番号 88-18-6 2-tert-ブチルフェノール 備考: 	魚類	使用可 3.7 mg/L	使用不可 phenols and anilines 3.58 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Phenols 2.17 mg/L Baseline Toxicity 6.52 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 2.74 mg/L
		甲殻類	使用可 3.7 mg/L	使用不可 phenols and anilines 3.74 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Phenols 1.23 mg/L Baseline Toxicity 4.22 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 1.73 mg/L

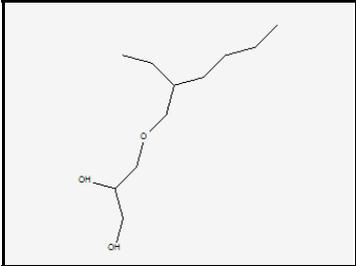
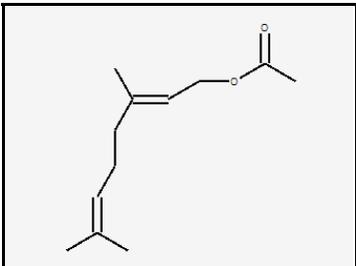
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
11	CAS番号 106-02-5  15-ペンタデカンオリド  備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 esters 0.171 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用不可 Esters 0.121 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0370 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 0.0689 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	> 0.17 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0416 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters 0.161 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0310 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 0.0736 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 240.39 logP(KowWin) 6.154 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.41E+0 ※3 [予測値] 0.1484 ※1 LUMO(eV) 1.09E+0~1.23E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
12	旧指定または旧2監通し番号 3834 CAS番号 54464-57-2  1-(2,3,8,8-テトラメチル-1,2,3,4,5,6,7,8-オクタヒドロ-2-ナフチル)エタン、1-(2,3,8,8-テトラメチル-1,2,3,4,6,7,8,8a-備考: 	魚類	使用可 1.3 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.482 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.540 mg/L	使用可 ketones 0.910 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 0.938 mg/L
		甲殻類	1.38 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.200 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.398 mg/L	使用可 Neutral Organics 0.763 mg/L
	分子量 234.39 logP(KowWin) 4.842 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.85E+0 ※3 [予測値] 1.077 ※1 LUMO(eV) 9.28E-1~1.04E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

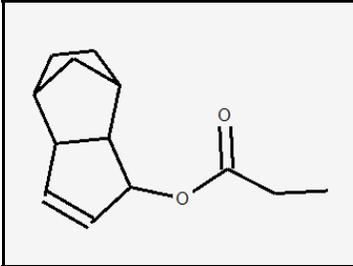
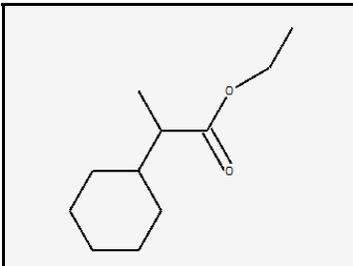
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
13	CAS番号 <b>104-67-6</b> γ-アルキルラクトン(C0~14) 備考: 	魚類	使用可 7.3 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 21.3 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 5.94 mg/L Baseline Toxicity 17.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 6.36 mg/L
		甲殻類	使用可 6.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 15.4 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 11.0 mg/L Baseline Toxicity 10.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 7.67 mg/L
14	CAS番号 <b>123-31-9</b> ヒドロキノン(別名 ベンゼン-1,4-ジオール) 備考: 	魚類	使用可 0.097 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 384 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Phenols, Poly 22.2 mg/L OHydroquinones 0.160 mg/L Baseline Toxicity 669 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols1 0.457 mg/L
		甲殻類	使用可 0.061 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 573 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Phenols, Poly 256 mg/L OHydroquinones 0.212 mg/L Baseline Toxicity 347 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols1 0.560 mg/L

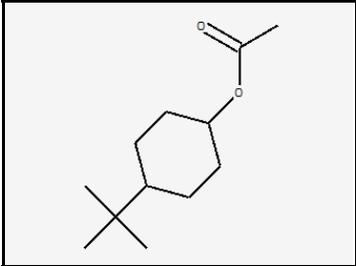
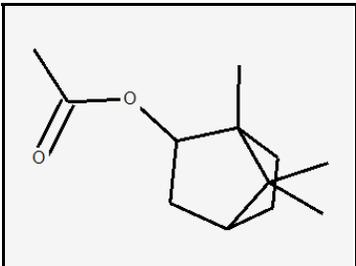
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
16	CAS番号 100-52-7  ベンズアルデヒド  備考:   分子量 106.13 logP(KowWin) 1.71 ※2 対水溶解(mg/L) 6100 ※1 logBCFmaxtox 1.28E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI 3.06E-1~2.85E-1 ※5 Qc ※6	魚類	使用可  1.07 mg/L	使用可  aldehydes 8.26 mg/L	使用可  ○Aldehydes (Mono) 8.60 mg/L Baseline Toxicity 159 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  aldehydes 8.68 mg/L
		甲殻類	使用可  50 mg/L	使用可  Reactive unspecified 107 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  ○Aldehydes (Mono) 16.0 mg/L Baseline Toxicity 87.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  aldehydes 8.53 mg/L
17	CAS番号 8050-09-7  ロジン  備考: 主成分の一つアビエチン酸 (514-10-3)として予測    分子量 302.46 logP(KowWin) 6.461 ※2 対水溶解(mg/L) 0.0896 ※1 logBCFmaxtox 4.5E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 9.61E-2~5.16E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可  > 1 mg/L	使用不可  Reactive unspecified 0.0257 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  Rosins 1.17 mg/L ※P,判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0240 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  acids 0.269 mg/L ※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)
		甲殻類	使用可  911 mg/L	使用不可  Reactive unspecified 0.00946 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  Rosins 2.00 mg/L ※P,判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0210 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  acids 14.4 mg/L ※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)

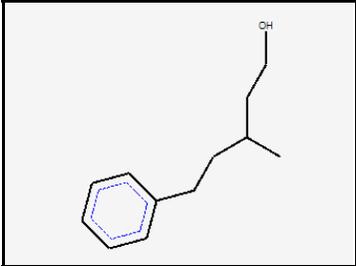
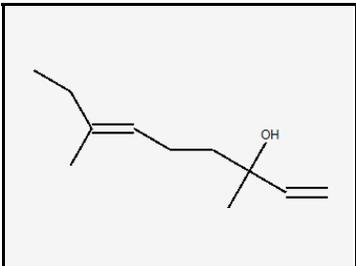
#	化学物質	対象	毒性値						
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9			
18	CAS番号 <b>32388-55-9</b> 1-(2,6,6,8-テトラメチルトリシクロ[5,3,1,0(1,5)]ウンデカ-8-エン-9-イル)エタン-1-オン 備考: 	魚類	使用可 > 0.184 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.495 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Vinyl/Allyl Ketones 1.25 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.392 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems2 0.573 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)			
		甲殻類	使用可 > 0.21 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.241 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Vinyl/Allyl Ketones 0.323 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.295 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems2 1.47 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)			
			分子量	246.4	logP(KowWin)	5.02 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	3.73E+0 ※3			
			[予測値]	1.278 ※1	LUMO(eV)	1.81E-1~8.07E-1 ※4			
					ODDI	※5			
					Qc	※6			
19	CAS番号 <b>93-92-5</b> 酢酸メチルベンジル 備考: 	魚類	使用可 18.32 mg/L	使用不可 esters 12.2 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 11.2 mg/L Baseline Toxicity 48.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aromatic 12.3 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)			
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 34.3 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 22.1 mg/L Baseline Toxicity 28.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aromatic 30.6 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)			
			分子量	164.21	logP(KowWin)	2.499 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	1.86E+0 ※3			
			[予測値]	481.1 ※1	LUMO(eV)	3.67E-2~3.97E-1 ※4			
					ODDI	※5			
					Qc	※6			

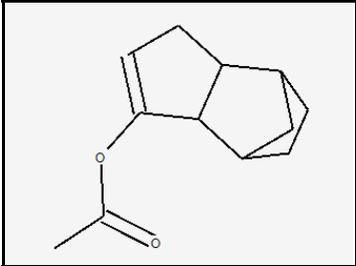
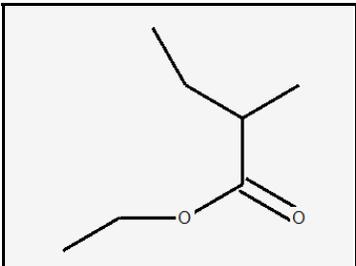
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
20	<b>旧3監:231</b> CAS番号 <b>843-55-0</b>  <b>1,1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)-シクロヘキサン</b>  備考: 	魚類	使用可 1.82 mg/L	使用不可 phenols and anilines 0.462 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OPhenols, Poly 0.233 mg/L Baseline Toxicity 0.442 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols2(ClogP) 2.91 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 1.81 mg/L	使用不可 phenols and anilines 1.11 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OPhenols, Poly 0.554 mg/L Baseline Toxicity 0.331 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols2(ClogP) 6.37 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
21	CAS番号 <b>120-57-0</b>  <b>ピペロナール</b>  備考: 	魚類	使用可 2.5 mg/L	使用不可 aldehydes 3.84 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OAldehydes (Mono) 11.3 mg/L Benzodioxoles 448 mg/L Baseline Toxicity 198 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 11.5 mg/L
		甲殻類	使用可 52 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 33.9 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aldehydes (Mono) 20.4 mg/L O Benzodioxoles 0.168 mg/L Baseline Toxicity 110 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 11.2 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			分子量 268.36 対水溶解(mg/L) [予測値] 3.782 ※1 logP(KowWin) 5.004 ※2 logBCFmaxtox 3.72E+0 ※3 LUMO(eV) 3.66E-1~4.02E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6			
			分子量 150.13 対水溶解(mg/L) [予測値] 9612 ※1 logP(KowWin) 1.772 ※2 logBCFmaxtox 1.32E+0 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.93E-1~2.92E-1 ※5 Qc ※6			

#	化学物質	対象	毒性値						
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9			
22	CAS番号 <b>70445-33-9</b> 6-エチル-4-オキサデカン-1,2-ジオール 備考: 	魚類	使用可 42 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 189 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 107 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 238 mg/L Neutral Organics 128 mg/L			
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 144 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 62.1 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 92.3 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 35.3 mg/L			
			分子量	204.31	logP(KowWin)	2.217 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	1.65E+0 ※3			
			[予測値]	531.9 ※1	LUMO(eV)	2.36E+0~2.93E+0 ※4			
					ODDI	※5			
					Qc	※6			
23	CAS番号 <b>105-87-3</b> 酢酸ゲラニル 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 1.30 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 0.941 mg/L ○ Vinyl/Allyl Esters 0.552 mg/L Baseline Toxicity 0.965 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 0.720 mg/L			
		甲殻類	使用可 14.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.682 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 1.50 mg/L Vinyl/Allyl Esters 1.87 mg/L Baseline Toxicity 0.688 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems2 1.75 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)			
			分子量	196.29	logP(KowWin)	4.475 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	3.33E+0 ※3			
			[予測値]	18.24 ※1	LUMO(eV)	6.49E-1~1.07E+0 ※4			
					ODDI	※5			
					Qc	※6			

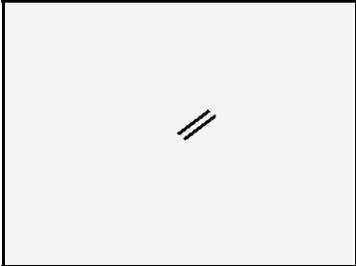
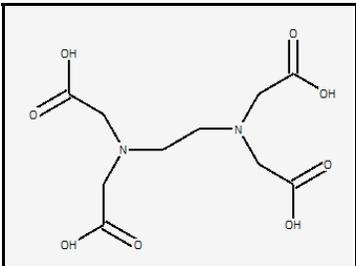
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
24	CAS番号 <b>68912-13-0</b> 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7- methano-1H-indenyl propionate 備考:  分子量 206.29 logP(KowWin) 3.338 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.49E+0 ※3 [予測値] 57.27 ※1 LUMO(eV) 5.65E-1~1.12E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 6.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 11.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 4.56 mg/L ○ Vinyl/ Allyl Esters 0.902 mg/L Baseline Toxicity 10.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 1.96 mg/L
		甲殻類	使用可 > 14 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8.08 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 8.22 mg/L ○ Vinyl/ Allyl Esters 4.73 mg/L Baseline Toxicity 6.84 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems2 4.23 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
25	CAS番号 <b>2511-00-4</b> Cyclohexaneacetic acid, .alpha.-methyl-, ethyl ester 備考:  分子量 184.28 logP(KowWin) 4.043 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.01E+0 ※3 [予測値] 18.52 ※1 LUMO(eV) 1.01E+0~1.29E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 8.6 mg/L	使用不可 esters 2.11 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 1.58 mg/L Baseline Toxicity 2.22 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 1.39 mg/L ※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)
		甲殻類	使用可 1.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.78 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 2.64 mg/L Baseline Toxicity 1.52 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 1.61 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)

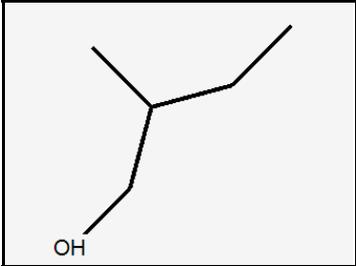
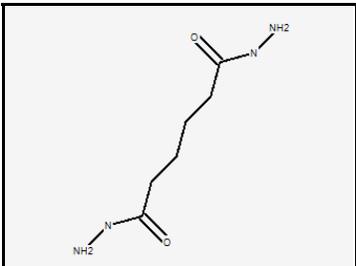
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
26	CAS番号 <b>32210-23-4</b> 4-tert-ブチルシクロヘキサン-1-イル=アセタート 備考: 	魚類	使用可 8.6 mg/L	使用不可 esters 1.39 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 1.02 mg/L Baseline Toxicity 1.09 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 0.828 mg/L ※P, ※f:判定不能(logP適用範囲外,麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 5.3 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.889 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 1.64 mg/L Baseline Toxicity 0.772 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 0.946 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
27	CAS番号 <b>125-12-2</b> 1,7,7-トリメチル-2-アセトキシビシクロ[2.2.1]ヘプタン 備考: 	魚類	使用可 9.9 mg/L	使用不可 esters 3.18 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 2.16 mg/L Baseline Toxicity 3.47 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 1.97 mg/L ※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)
		甲殻類	使用可 10.5 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2.95 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 3.68 mg/L Baseline Toxicity 2.34 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 2.30 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
			分子量 198.31 logP(KowWin) 4.423 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.3E+0 ※3 [予測値] 3.552 ※1 LUMO(eV) 1.19E+0~1.22E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6			
			分子量 196.29 logP(KowWin) 3.857 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.88E+0 ※3 [予測値] 9.721 ※1 LUMO(eV) 1.18E+0~1.29E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6			

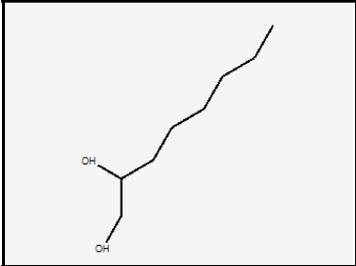
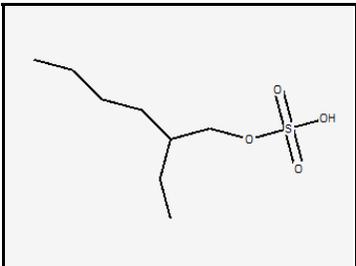
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
28	CAS番号 <b>55066-48-3</b> 3-methyl-5-phenylpentanol 備考:  分子量 178.28 logP(KowWin) 3.457 ※2 対水溶解(mg/L) 202.6 ※1 logBCFmaxtox 2.58E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 3.91E-1~6.81E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 7.06 mg/L	使用不可 Neutral Organics 7.19 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 18.2 mg/L Neutral Organics 10.3 mg/L
		甲殻類	13 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 5.16 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 4.67 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 13.1 mg/L Neutral Organics 4.72 mg/L
29	CAS番号 <b>10339-55-6</b> 3,7-ジメチルノナ-1,6-ジエン-3-オール 備考:  分子量 168.28 logP(KowWin) 3.872 ※2 対水溶解(mg/L) 99.98 ※1 logBCFmaxtox 2.89E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.05E+0~1.33E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	24 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 4.04 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Vinyl/Allyl Alcohols 1.71 mg/L Baseline Toxicity 2.88 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 1.02 mg/L
		甲殻類	23 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 2.37 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Vinyl/Allyl Alcohols 0.278 mg/L Baseline Toxicity 1.94 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 2.33 mg/L

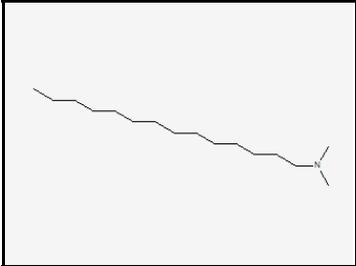
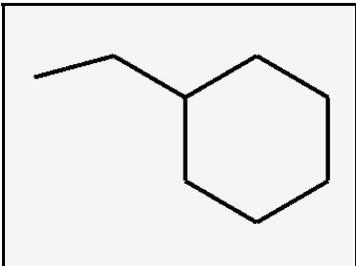
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
31	CAS番号 <b>54830-99-8</b> 4,7-Methano-1H-indenol, 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-, acetate 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 esters 8.58 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Esters 6.91 mg/L ○ Vinyl/Allyl Esters 0.967 mg/L Baseline Toxicity 21.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 2.47 mg/L
		甲殻類	25 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 16.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 12.9 mg/L ○ Vinyl/Allyl Esters 5.82 mg/L Baseline Toxicity 13.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 5.14 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
32	CAS番号 <b>7452-79-1</b> Ethyl 2-methylbutyrate 備考: 	魚類	> 100 mg/L	使用不可 esters 22.0 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 12.2 mg/L Baseline Toxicity 62.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 15.4 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	>= 61.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 59.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 24.7 mg/L Baseline Toxicity 36.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 19.1 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)

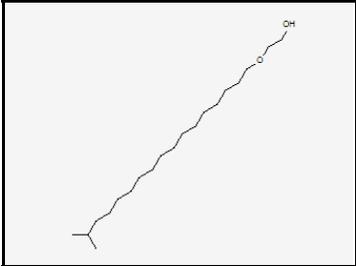
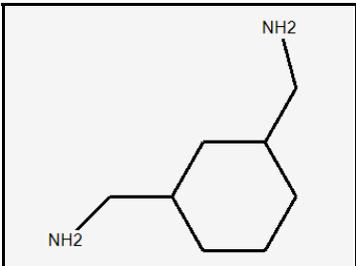


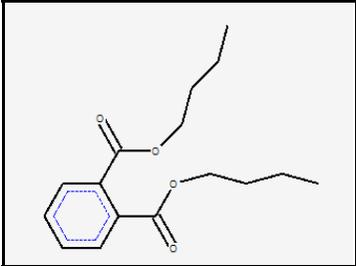
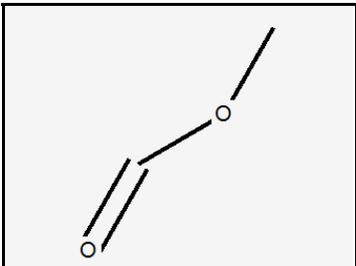
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
38	CAS番号 74-85-1  エチレン  備考:   分子量 28.05 logP(KowWin) 1.266 ※2 対水溶解(mg/L) 3449 ※1 logBCFmaxtox 9.44E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.44E+0~1.44E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 105 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 105 mg/L	使用可 hydrocabons aliphatic 58.9 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 110 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 121 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 55.8 mg/L	使用可 hydrocabons aliphatic 4.96 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 20.4 mg/L
39	CAS番号 64-02-8  テトラナトリウム=2, 2', 2'', 2'''-(エチレンジニトリロ)テトラアセタート  備考: NaをHに置換し予測アミン類   分子量 292.25 logP(KowWin) -3.857 ※2 対水溶解(mg/L) 228200 ※1 logBCFmaxtox -2.88E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 2.41E-1~7.14E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	156 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9780000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 3960000 mg/L Baseline Toxicity 4.37e+7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 1980000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	610 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5.86e+7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 239000 mg/L Baseline Toxicity 1.45e+7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 78700 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
41	CAS番号 137-32-6 2-メチルブタン-1-オール 備考: 	魚類	> 120 mg/L	使用可 basesurface narcotics 782 mg/L	使用可 Neutral Organics 335 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 675 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 349 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	> 173 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 658 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 178 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 162 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 64.9 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
	分子量 88.15 logP(KowWin) 1.259 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 9.39E-1 ※3 [予測値] 32200 ※1 LUMO(eV) 3.46E+0~3.56E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
42	CAS番号 1071-93-8 アジピン酸ジヒドラジド 備考: 	魚類	> 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 479000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Hydrazines 63.8 mg/L Amides 74100 mg/L Baseline Toxicity 1310000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 hydrazines or polyamines 56.5 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	>= 106 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1750000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Hydrazines 845 mg/L Amides 622000 mg/L Baseline Toxicity 494000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 hydrazines or polyamines(ClogP) 9.17 mg/L
	分子量 174.2 logP(KowWin) -2.41 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.8E+0 ※3 [予測値] 328700 ※1 LUMO(eV) 7.51E-1~9.89E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

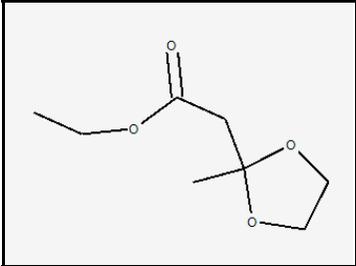
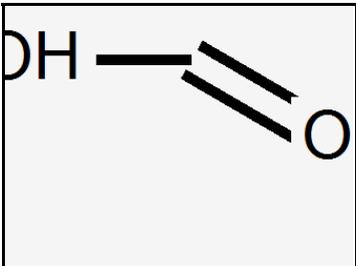
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
44	CAS番号 1117-86-8 オクタン-1, 2-ジオール 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 527 mg/L	使用可 Neutral Organics 236 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 497 mg/L Neutral Organics 261 mg/L
		甲殻類	176 mg/L	使用可 basesurface narcotics 413 mg/L	使用可 Neutral Organics 130 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 147 mg/L Neutral Organics 57.5 mg/L
	分子量 146.23 logP(KowWin) 1.673 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.25E+0 ※3 [予測値] 2933 ※1 LUMO(eV) 3.17E+0~3.32E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
46	CAS番号 126-92-1 2-エチルヘキシル硫酸ナトリウム 備考: NaをHに置換し予測 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 1710 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 4880 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 4960 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	483 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3530 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 2390 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 224 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
	分子量 210.29 logP(KowWin) 0.384 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.86E-1 ※3 [予測値] 18200 ※1 LUMO(eV) -6.42E-1~-5.26E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

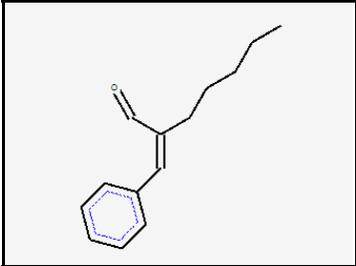
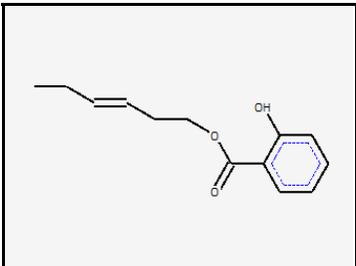
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
47	CAS番号 112-75-4  N, N-ジメチルテトラデカン-1-イルアミン  備考: アミン類    分子量 241.46 logP(KowWin) 6.423 ※2 対水溶解(mg/L) 0.8787 ※1 logBCFmaxtox 4.49E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.35 mg/L	使用可 narcotic amines 0.135 mg/L	使用不可 Aliphatic Amines 0.0580 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0210 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 0.0406 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.51 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0549 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Aliphatic Amines 0.0110 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0180 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 21.3 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
49	旧3監通し番号:104 CAS番号 1678-91-7  エチルシクロヘキサン  備考:    分子量 112.22 logP(KowWin) 4.084 ※2 対水溶解(mg/L) 3.962 ※1 logBCFmaxtox 3.05E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 3.58E+0~3.64E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.75 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1.73 mg/L	使用可 Neutral Organics 1.24 mg/L	使用可 Ohydrocarbons aliphatic 1.77 mg/L Neutral Organics 1.93 mg/L
		甲殻類	使用可 0.67 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.642 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.852 mg/L	使用可 Ohydrocarbons aliphatic 0.778 mg/L Neutral Organics 1.15 mg/L

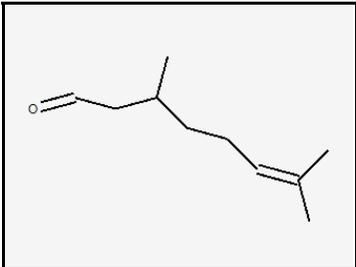
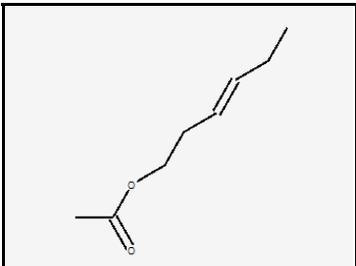
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
50	CAS番号 52292-17-8 Poly(oxy-1,2-ethanediyl), alpha.-isooctadecyl-.omega.-hydroxy- 備考: n=1として予測 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 0.412 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.00400 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.0148 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.00971 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	1.9 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.109 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.00400 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.0742 mg/L ※P, ※f;判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 0.0224 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
51	旧指定または旧2監通し番号 :947 CAS番号 2579-20-6 シクロヘキサン-1, 3-ジイルビス(メチルアミン) 備考: アミン類 	魚類	実測データなし	使用可 narcotic amines 148 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 112 mg/L Baseline Toxicity 802 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 151 mg/L
		甲殻類	65.4 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1520 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 12.0 mg/L Baseline Toxicity 418 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 15.5 mg/L

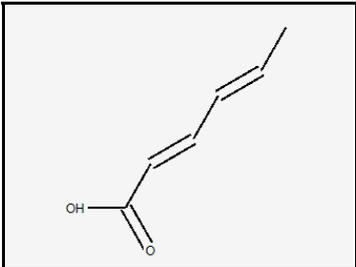
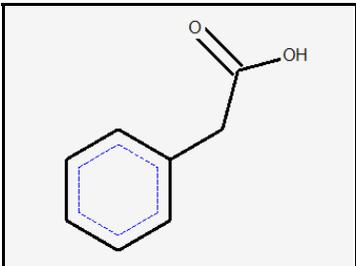
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
52	CAS番号 <b>84-74-2</b> ジブタン-1-イル=フタラート 備考: 	魚類	使用可 0.48 mg/L	使用可 esters 0.596 mg/L	使用可 ○Esters 1.11 mg/L Baseline Toxicity 1.04 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aromatic 1.72 mg/L
		甲殻類	使用可 2.99 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.492 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 1.75 mg/L Baseline Toxicity 0.748 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aromatic 5.57 mg/L
	分子量 278.35 対水溶解(mg/L) [予測値] 2.351 ※1 logP(KowWin) 4.61 ※2 logBCFmaxtox 3.43E+0 ※3 LUMO(eV) -8.35E-1~-6.2E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
54	CAS番号 <b>107-31-3</b> ギ酸メチル 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 esters 394 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 149 mg/L Baseline Toxicity 4420 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 308 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 500 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5280 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 392 mg/L Baseline Toxicity 2050 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 421 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
	分子量 60.05 対水溶解(mg/L) [予測値] 129300 ※1 logP(KowWin) -0.174 ※2 logBCFmaxtox -1.3E-1 ※3 LUMO(eV) 1.08E+0~1.09E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

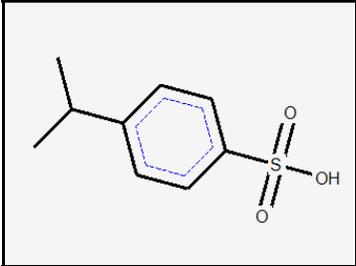
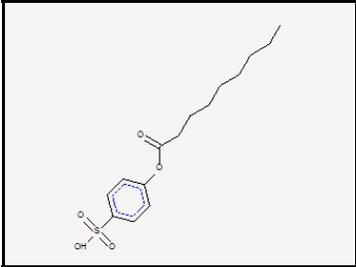


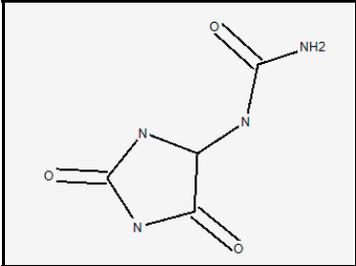
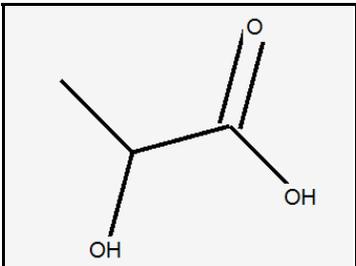
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
60	CAS番号 <b>6413-10-1</b> エチル-2-メチル-1,3-ジオキソラン-2-アセテート 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 esters 124 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OEsters 59.7 mg/L Baseline Toxicity 608 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 91.3 mg/L
		甲殻類	使用可 ≥ 99 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 633 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 134 mg/L Baseline Toxicity 324 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 118 mg/L
62	CAS番号 <b>141-53-7</b> ギ酸ナトリウム 備考: NaをHで置換し予測 	魚類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 aldehydes 53.7 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Baseline Toxicity 6130 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 4470 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7370 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 2770 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 75.6 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
63	CAS番号 122-40-7  アミルケイ皮アルデヒド  備考:   分子量 202.3 logP(KowWin) 4.33 ※2 対水溶解(mg/L) 8.545 ※1 logBCFmaxtox 3.23E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI 2.8E-1~2.97E-1 ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.91 mg/L	使用可 aldehydes 0.835 mg/L	使用可 ○Vinyl/Allyl Aldehydes 0.176 mg/L Baseline Toxicity 1.34 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 0.882 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.28 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.693 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Vinyl/Allyl Aldehydes 1.46 mg/L Baseline Toxicity 0.946 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 0.633 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
64	CAS番号 65405-77-8  3-ヘキセニルサリチレート  備考:   分子量 220.27 logP(KowWin) 4.844 ※2 対水溶解(mg/L) 9.518 ※1 logBCFmaxtox 3.6E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -5.08E-1~-3.47E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 3.8 mg/L	使用不可 phenols and anilines 0.309 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Esters 0.643 mg/L ○ Phenols 0.264 mg/L Baseline Toxicity 0.505 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 0.380 mg/L
		甲殻類	使用可 2.7 mg/L	使用不可 phenols and anilines 0.787 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Esters 0.985 mg/L ○ Phenols 0.282 mg/L Baseline Toxicity 0.373 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amines aromatic or phenols4 0.495 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)

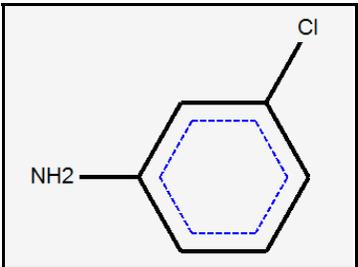
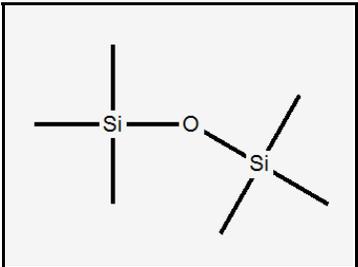
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
66	CAS番号 106-23-0  シトロネラル  備考:    分子量 154.25 logP(KowWin) 3.531 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.63E+0 ※3 [予測値] 38.94 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.69E-1~2.77E-1 ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用可 aldehydes 2.51 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 1.39 mg/L Baseline Toxicity 5.35 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 1.64 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	8.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4.33 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 1.05 mg/L Baseline Toxicity 3.50 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 1.30 mg/L ※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)
67	CAS番号 3681-71-8  酢酸ヘキセニル  備考:    分子量 142.2 logP(KowWin) 2.614 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.95E+0 ※3 [予測値] 480.5 ※1 LUMO(eV) 8.57E-1~1.17E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	13 mg/L	使用不可 esters 3.80 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 8.33 mg/L Baseline Toxicity 32.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 9.76 mg/L
		甲殻類	31 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8.47 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 16.2 mg/L Baseline Toxicity 19.7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 12.0 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)

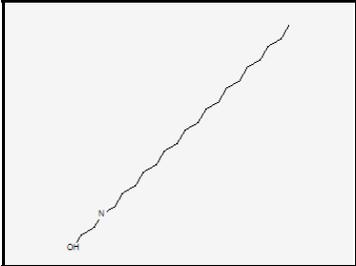
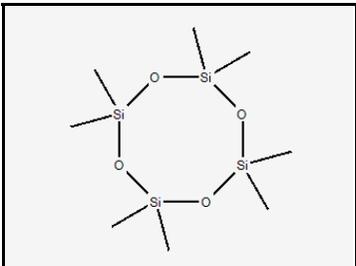
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
68	CAS番号 110-44-1  ソルビン酸  備考: 	魚類	使用可 75 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 87.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 2020 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids acrylic 64.1 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 70 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 128 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1110 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids acrylic 51.2 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
69	CAS番号 103-82-2  フェニル酢酸  備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 58.4 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 3650 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 558 mg/L
		甲殻類	使用可 140 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 78.9 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1960 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 85.1 mg/L
			分子量 112.13	logP(KowWin) 1.621 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 1.21E+0 ※3		
			[予測値] 19440 ※1	LUMO(eV) -7.13E-1~1.51E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
			分子量 136.15	logP(KowWin) 1.428 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 1.07E+0 ※3		
			[予測値] 13480 ※1	LUMO(eV) 1.53E-1~2.54E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

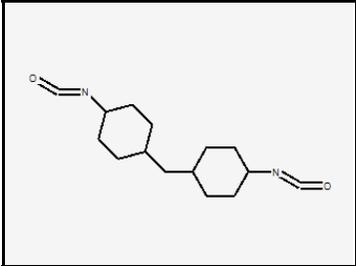
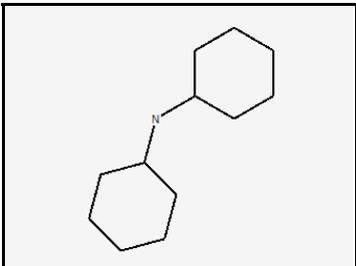
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
70	CAS番号 <b>28348-53-0</b> ナトリウム=イソプロピルベンゼンスルホナート 備考: NaをHに置換し、4-(1-イソプロピル)ベンゼンスルホナートとして予測 	魚類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1770 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 56400 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 5520 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3880 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 27300 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 224 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
71	CAS番号 <b>91125-43-8</b> ナトリウム=(ノナノイルオキシ)ベンゼンスルホナート 備考: NaをHに置換し、4-(ノナノイルオキシ)ベンゼンスルホン酸として予測 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 119 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters-acid 501 mg/L Baseline Toxicity 338 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 614 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 179 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters-acid 1060 mg/L Baseline Toxicity 190 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 157 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)

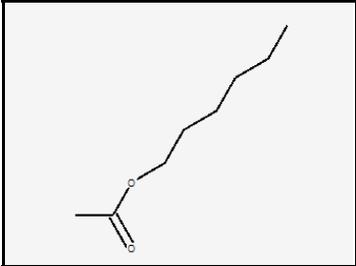
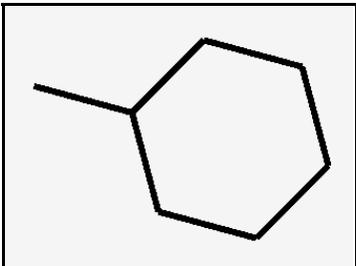
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
72	CAS番号 97-59-6 5-ウレイドヒダントイン 備考: 	魚類	使用可 > 5000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1130000 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Substituted Ureas 774000 mg/L ○ Carbonyl Ureas 14200 mg/L Baseline Toxicity 5350000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amides or imides 240000 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 5930000 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Substituted Ureas 1640000 mg/L ○ Carbonyl Ureas 748000 mg/L Baseline Toxicity 1890000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amides or imides 482000 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
73	CAS番号 72-17-3 ナトリウム=2-ヒドロキシプロパノアート 備考: NaをHに置換し予測 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 9290 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 177000 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems1 14.7 mg/L
		甲殻類	使用可 > 10000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 20500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 78800 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems1 73.6 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)

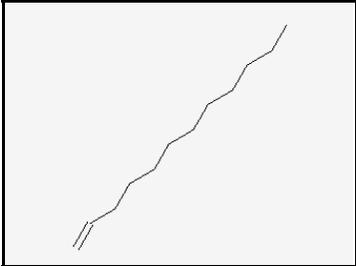
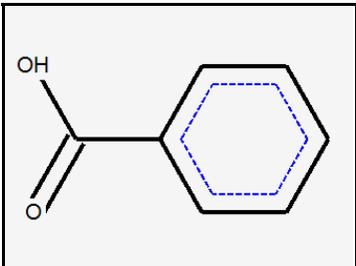
生態影響に関する優先度判定案:2. 再審議物質

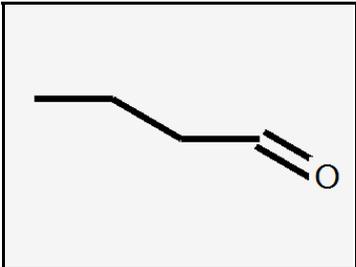
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
1	<p>旧指定または旧2監通し番号 CAS番号 108-42-9 :405 旧3監:18</p> <p>m-クロロアニリン</p> <p>備考: アミン類</p>  <p>分子量 127.57 logP(KowWin) 1.72 ※2                      対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.28E+0 ※3                      [予測値] 2331 ※1 LUMO(eV) 2.64E-1~2.64E-1 ※4                      ODDI ※5                      Qc ※6</p>	魚類	使用可 8.79 mg/L	使用可 phenols and anilines 47.5 mg/L	使用可 ○Anilines (Unhindered) 28.5 mg/L Baseline Toxicity 187 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols3 7.55 mg/L
		甲殻類	使用可 0.493 mg/L	使用不可 phenols and anilines 20.9 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.918 mg/L Baseline Toxicity 103 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols3 1.14 mg/L
2	<p>CAS番号 107-46-0</p> <p>ヘキサメチルジシロキサン</p> <p>備考:</p>  <p>分子量 162.38 logP(KowWin) 5.248 ※2                      対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.54E+0 ※3                      [予測値] 0.9168 ※1 LUMO(eV) 1.3E+0~1.3E+0 ※4                      ODDI ※5                      Qc ※6</p>	魚類	使用可 0.46 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.832 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.161 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.167 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 > 11 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.365 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.124 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.178 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)

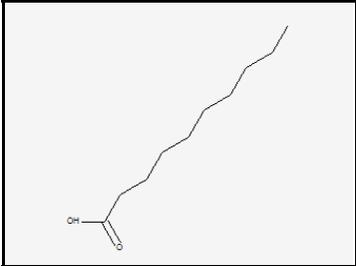
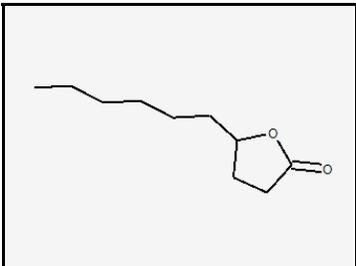
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
3	CAS番号 61791-26-2 Amines, tallow alkyl, ethoxylated  備考: アミン類 C=18, n=1として予測    分子量 313.57 logP(KowWin) 7.202 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.39E+0 ※3 [予測値] 0.07357 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 1.0 mg/L	使用可 narcotic amines 0.216 mg/L	使用不可 Aliphatic Amines 0.0230 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.00500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 0.0152 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 2.35 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0920 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Aliphatic Amines 0.00500 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.00500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 21.8 mg/L ※P, ※f:判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
4	CAS番号 556-67-2 2, 2, 4, 4, 6, 6, 8, 8-オクタメチルシクロテトラシロキサン  備考:    分子量 296.62 logP(KowWin) 6.788 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.78E+0 ※3 [予測値] 0.06124 ※1 LUMO(eV) 1.54E+0~1.54E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 0.0517 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.936 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.0120 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.0214 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 > 0.015 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.361 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.0110 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.0399 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)

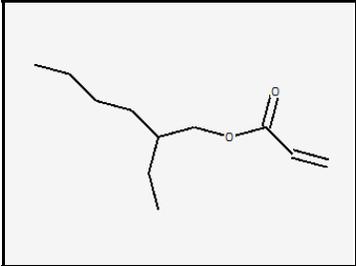
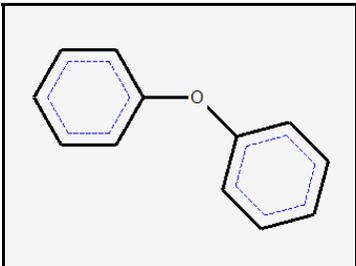
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
5	<b>旧3監:232</b> CAS番号 メチレンビス(4, 1-シクロヘキシレン) = ジイソシアネート 備考:  分子量 262.35 logP(KowWin) 6.115 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.78E+0 ※3 [予測値] 0.1211 ※1 LUMO(eV) 6.03E-1 ※4 ODDI 0.E+0 ※5 Qc 0.E+0 ※6	魚類	使用可 1.2 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.167 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 0.0430 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 0.0604 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 0.0772 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 0.0360 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 0.0883 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
6	<b>旧指定または旧2監通し番号 :1084 旧3監:275</b> CAS番号 <b>101-83-7</b> N, N-ジシクロヘキシルアミン 備考: アミン類  分子量 181.32 logP(KowWin) 4.367 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.25E+0 ※3 [予測値] 103.1 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 12 mg/L	使用可 narcotic amines 1.26 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 0.971 mg/L Baseline Toxicity 1.12 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 0.806 mg/L ※P, ※f:判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.49 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 0.152 mg/L Baseline Toxicity 0.788 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 30.0 mg/L ※P, ※f:判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)

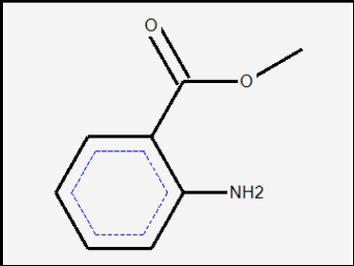
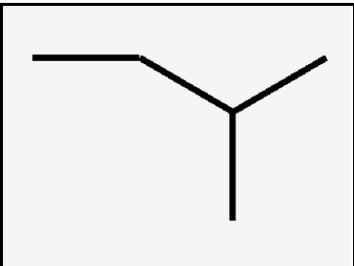
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
7	CAS番号 142-92-7  酢酸ヘキシル  備考:   分子量 144.22 logP(KowWin) 2.829 ※2 対水溶解(mg/L) 308.7 ※1 logBCFmaxtox 2.11E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.11E+0~1.17E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 4 mg/L	使用可 esters 10.6 mg/L	使用可 OEsters 6.33 mg/L Baseline Toxicity 21.4 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 7.09 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 19.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 12.0 mg/L Baseline Toxicity 13.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 8.63 mg/L
8	旧3監:213 CAS番号  メチルシクロヘキサン  備考:   分子量 98.19 logP(KowWin) 3.593 ※2 対水溶解(mg/L) 28.4 ※1 logBCFmaxtox 1.98E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 3.61E+0 ※4 ODDI 0.E+0 ※5 Qc 0.E+0 ※6	魚類	使用可 2.1 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 9.80 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2.99 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 3.63 mg/L Neutral Organics 4.35 mg/L
		甲殻類	使用可 0.33 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 5.13 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1.97 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 1.20 mg/L Neutral Organics 2.12 mg/L

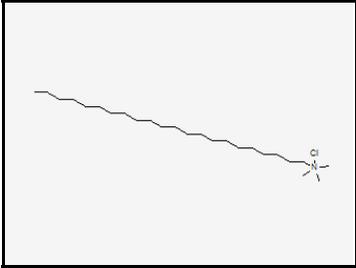
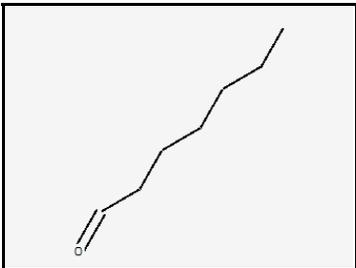
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
9	<b>旧3監:268</b> CAS番号 <b>ドデカ-1-エン</b> 備考: 	魚類	実測データなし	<b>使用可</b> basesurface narcotics 0.144 mg/L	<b>使用不可</b> Neutral Organics 0.0290 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	<b>使用不可</b> hydrocabons aliphatic 0.0804 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.0600 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	実測データなし	<b>使用不可</b> basesurface narcotics 0.0609 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	<b>使用不可</b> Neutral Organics 0.0240 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	<b>使用不可</b> hydrocabons aliphatic 0.115 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.0820 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 168.33 logP(KowWin) 6.098 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.78E+0 ※3 [予測値] 0.1127 ※1 LUMO(eV) 1.37E+0 ※4 ODDI 0.E+0 ※5 Qc 0.E+0 ※6					
11	<b>官報公示整理:3-1397</b> CAS番号 <b>65-85-0</b> <b>安息香酸</b> 備考: 	魚類	<b>使用可</b> 44.6mg/L	<b>使用不可</b> Reactive unspecified 62.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用不可</b> Baseline Toxicity (acid) 1300 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用可</b> acids 237 mg/L
		甲殻類	> 100mg/L	<b>使用不可</b> Reactive unspecified 83.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用不可</b> Baseline Toxicity (acid) 730 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用可</b> acids 60.8 mg/L
	分子量 122.12 logP(KowWin) 1.874 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.4E+0 ※3 [予測値] 2493 ※1 LUMO(eV) -5.66E-1~-3.01E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

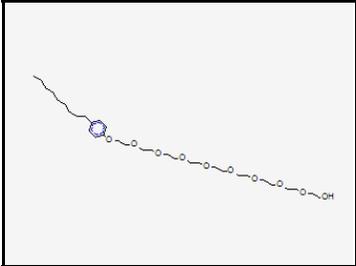
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
12	CAS番号 123-72-8 n-ブチルアルデヒド 備考: 	魚類	使用可 13.4 mg/L	使用可 aldehydes 22.1 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 17.2 mg/L Baseline Toxicity 685 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 16.0 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 707 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 50.0 mg/L Baseline Toxicity 349 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 17.5 mg/L
13	CAS番号 142-82-5 n-ヘプタン 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 8.62 mg/L	使用可 Neutral Organics 2.08 mg/L	使用可 ○hydrocabons aliphatic 2.68 mg/L Neutral Organics 3.10 mg/L
		甲殻類	使用可 1.5 mg/L	使用可 basesurface narcotics 3.43 mg/L	使用可 Neutral Organics 1.39 mg/L	使用可 ○hydrocabons aliphatic 0.987 mg/L Neutral Organics 1.63 mg/L

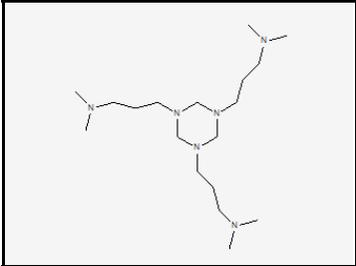
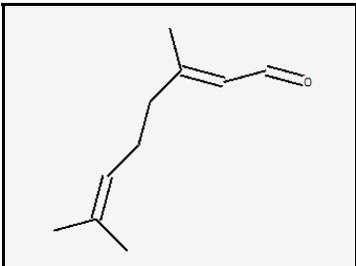
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
14	CAS番号 <b>334-48-5</b>  <b>デカン酸</b>  備考:   分子量 172.27 logP(KowWin) 4.016 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.99E+0 ※3 [予測値] 47.89 ※1 LUMO(eV) 1.02E+0~1.06E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 16 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3.13 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics-acid 21.9 mg/L	使用可 acids 9.22 mg/L
		甲殻類	使用可 > 20 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.77 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics-acid 15.0 mg/L	使用可 acids 28.7 mg/L
15	CAS番号 <b>706-14-9</b>  <b>5-ヘキシル-4, 5-デヒドロ-2(3H)フラン</b>  備考:   分子量 170.25 logP(KowWin) 2.567 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.92E+0 ※3 [予測値] 291.6 ※1 LUMO(eV) 1.15E+0~1.19E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 18 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 49.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 10.6 mg/L Baseline Toxicity 43.3 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 12.6 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 41.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 20.8 mg/L Baseline Toxicity 25.9 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 15.4 mg/L

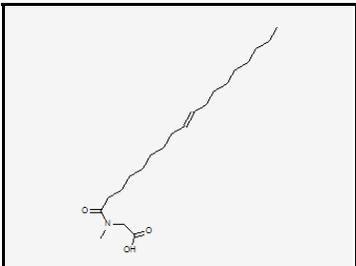
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
16	CAS番号 103-11-7 アクリル酸2-エチルヘキシル 備考: 	魚類	使用可 1.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.85 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Acrylates 0.769 mg/L Baseline Toxicity 2.00 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acrylates 0.625 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 1.3 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.21 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Acrylates 0.811 mg/L Baseline Toxicity 1.38 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acrylates 2.67 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
17	旧3監:98 CAS番号 101-84-8 フェノキシベンゼン 備考: 	魚類	使用可 1.8 mg/L	使用可 basesurface narcotics 2.00 mg/L	使用可 Neutral Organics 2.02 mg/L	使用可 ○ethers with aromatic 1.49 mg/L Neutral Organics 3.13 mg/L
		甲殻類	使用可 2 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1.29 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1.39 mg/L	使用可 ○ethers with aromatic 0.899 mg/L Neutral Organics 1.84 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
18	CAS番号 <b>134-20-3</b>  Methyl 2-aminobenzoate  備考: アミン類    分子量 151.17 logP(KowWin) 2.265 ※2 対水溶解(mg/L) 1860 ※1 logBCFmaxtox 1.69E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -2.03E-1~-1.19E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 25.4 mg/L	使用可 phenols and anilines 17.8 mg/L	使用可 ○Esters 14.2 mg/L Anilines (Hindered) 41.0 mg/L Baseline Toxicity 71.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols5 27.1 mg/L
		甲殻類	使用可 18.2 mg/L	使用不可 phenols and anilines 11.2 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Esters 28.6 mg/L ○ Anilines (Hindered) 11.7 mg/L Baseline Toxicity 41.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amines aromatic or phenols5 5.16 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
19	CAS番号 <b>78-78-4</b>  イソペンタン  備考:    分子量 72.15 logP(KowWin) 2.723 ※2 対水溶解(mg/L) 184.6 ※1 logBCFmaxtox 2.03E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 3.76E+0~3.77E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 46.6 mg/L	使用可 Neutral Organics 13.3 mg/L	使用不可 hydrocabons aliphatic 12.1 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 17.1 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 2.3 mg/L	使用可 basesurface narcotics 24.7 mg/L	使用可 Neutral Organics 8.06 mg/L	使用不可 hydrocabons aliphatic 2.39 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 5.80 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)

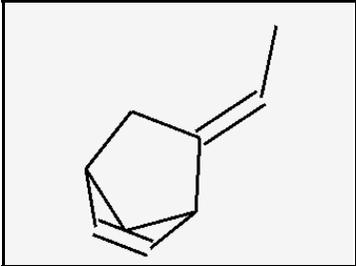
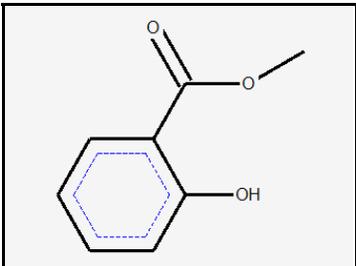
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
20	CAS番号 <b>68607-24-9</b> Quaternary ammonium compounds, C20-22-alkyltrimethyl, chlorides 備考: C=22として予測 	魚類	使用可 3.5 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Neutral Organics 0.0650 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 hydrocabons aliphatic 0.182 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 0.135 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 1.39 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Neutral Organics 0.0540 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 hydrocabons aliphatic 0.267 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 0.187 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			分子量 404.17 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.01675 ※1	logP(KowWin) 6.131 ※2 logBCFmaxtox ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6		
21	CAS番号 <b>111-71-7</b> ヘプタナール 備考: 	魚類	使用可 12 mg/L	使用可 aldehydes 6.11 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 4.60 mg/L Baseline Toxicity 51.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 4.88 mg/L
		甲殻類	使用可 4.13 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 46.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 6.43 mg/L Baseline Toxicity 30.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 4.47 mg/L
			分子量 114.19 対水溶解(mg/L) [予測値] 1167 ※1	logP(KowWin) 2.29 ※2 logBCFmaxtox 1.71E+0 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.88E-1~2.9E-1 ※5 Qc ※6		

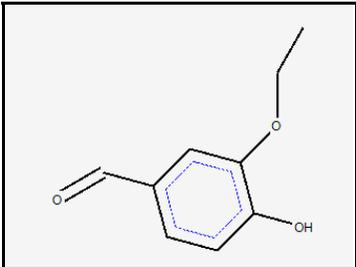
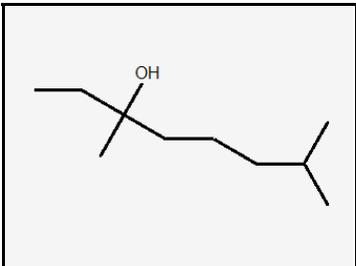
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
22	<b>旧3監:42</b> CAS番号 $\alpha$ -[(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル]- $\omega$ -ヒドロキシポリ(オキシエチレン) (別名ポリ(オキシエチレン)=オクチルフェニルエーテル) 備考: n=1として予測 	魚類	使用可 3mg/L	使用可 basesurface narcotics 26.0 mg/L	使用可 Neutral Organics 29.1 mg/L	使用可 Others with aromatic 20.6 mg/L Neutral Organics 41.1 mg/L
		甲殻類	使用可 14mg/L	使用不可 basesurface narcotics 20.0 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 18.8 mg/L	使用不可 ethers with aromatic 6.95 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 18.3 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
	分子重 616.84 logP(KowWin) 3.381 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.52E+0 ※3 [予測値] 0.5225 ※1 LUMO(eV) 1.96E-1~5.6E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
24	<b>旧指定または旧2監通し番号:1018</b> CAS番号 107-15-3 エチレンジアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 210 mg/L	使用可 narcotic amines 3700 mg/L	使用可 Aliphatic Amines 2750 mg/L Baseline Toxicity 87700 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 2380 mg/L
		甲殻類	使用可 4.5 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 214000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aliphatic Amines 215 mg/L Baseline Toxicity 35700 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 primary amines aliphatic 437 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子重 60.1 logP(KowWin) -1.618 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.21E+0 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

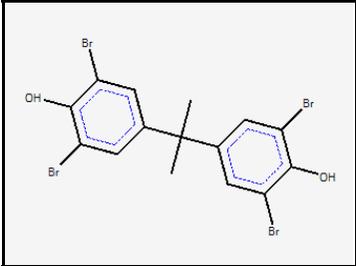
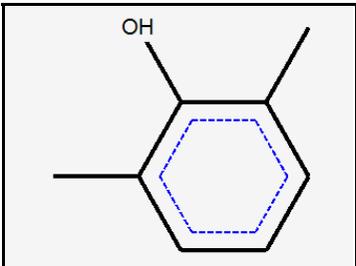
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
25	CAS番号 15875-13-5 1, 3, 5-トリリス(ジメチルアミノプロピル)ヘキサヒドロ-1, 3, 5-トリアジン 備考: アミン類 	魚類	使用可 >100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 370000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aliphatic Amines 15000 mg/L ○ Triazines, Aliphatic 569 mg/L Baseline Toxicity 469000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 20100 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 62.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 854000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aliphatic Amines 1180 mg/L ○ Triazines, Aliphatic 25.1 mg/L Baseline Toxicity 191000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 352 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
分子量 342.58 logP(KowWin) -1.588 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.18E+0 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 2.19E+0~2.81E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
26	CAS番号 5392-40-5 シトラール 備考: 	魚類	使用可 4.1 mg/L	使用可 aldehydes 1.67 mg/L	使用可 ○Vinyl/Allyl Aldehydes 0.162 mg/L Baseline Toxicity 6.30 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems1 0.162 mg/L
		甲殻類	使用可 6.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3.93 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Vinyl/Allyl Aldehydes 5.79 mg/L Baseline Toxicity 4.09 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 0.0264 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
分子量 152.24 logP(KowWin) 3.445 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.57E+0 ※3 [予測値] 84.71 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.92E-1~3.01E-1 ※5 Qc ※6						

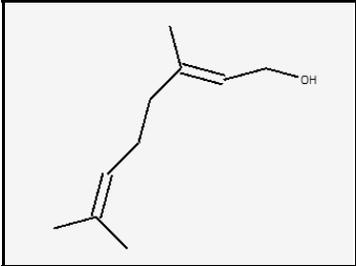
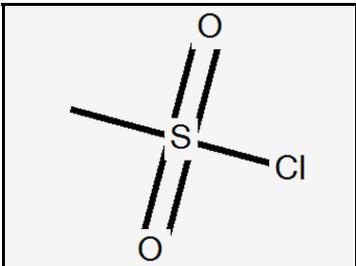
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
27	CAS番号 109-66-0  n-ペンタン  備考:    分子量 72.15 logP(KowWin) 2.797 ※2 対水溶解(mg/L) 49.76 ※1 logBCFmaxtox 2.09E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 3.77E+0~3.85E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 4.26 mg/L	使用可 basesurface narcotics 40.9 mg/L	使用可 Neutral Organics 11.4 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 10.6 mg/L Neutral Organics 14.8 mg/L
		甲殻類	使用可 2.7 mg/L	使用可 basesurface narcotics 21.1 mg/L	使用可 Neutral Organics 6.97 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 2.20 mg/L Neutral Organics 5.18 mg/L
28	CAS番号 110-25-8  オレオイルザルコシン  備考:    分子量 353.55 logP(KowWin) 6.831 ※2 対水溶解(mg/L) 0.008645 ※1 logBCFmaxtox 4.5E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 6.13E-1~9.01E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 0.43 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.124 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAmides -acid 0.371 mg/L Baseline Toxicity 0.0130 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amides or imides 0.0480 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.43 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0420 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAmides -acid 0.0440 mg/L Baseline Toxicity 0.0120 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amides or imides 0.00720 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)

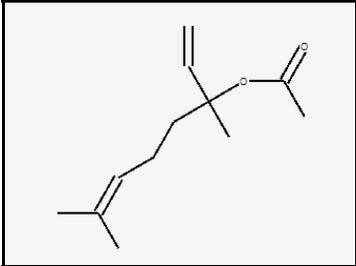
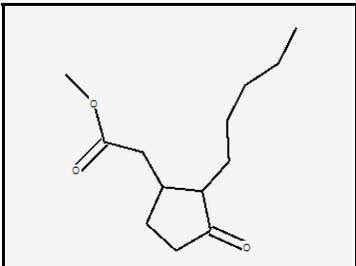


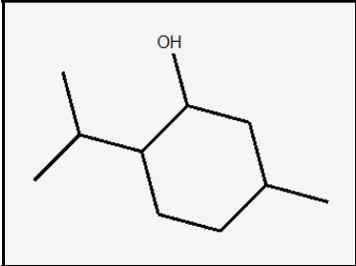
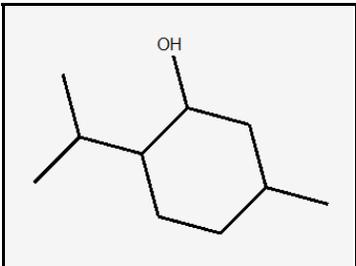
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
31	旧指定または旧2監通し番号 CAS番号 :710 旧3監:79  5-エチリデンビシクロ[2.2.1]ヘプター-2-エン  備考: 	魚類	使用可 7 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 3.96 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3.10 mg/L	使用可 ○hydrocabons aliphatic 3.86 mg/L Neutral Organics 4.55 mg/L
		甲殻類	使用可 3.3 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 2.74 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2.06 mg/L	使用可 ○hydrocabons aliphatic 1.34 mg/L Neutral Organics 2.29 mg/L
	分子量 120.2 logP(KowWin) 3.674 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.05E+0 ※3 [予測値] 15.91 ※1 LUMO(eV) 1.1E+0 ※4 ODDI 0.E+0 ※5 Qc 0.E+0 ※6					
32	CAS番号 119-36-8  メチル=2-ヒドロキシベンゾアート  備考: 	魚類	使用可 >100 mg/L	使用可 phenols and anilines 8.74 mg/L	使用可 ○Esters 9.03 mg/L Phenols 9.19 mg/L Baseline Toxicity 35.9 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 10.8 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 phenols and anilines 6.91 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Esters 17.6 mg/L ○ Phenols 3.62 mg/L Baseline Toxicity 21.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 4.49 mg/L
	分子量 152.15 logP(KowWin) 2.604 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.94E+0 ※3 [予測値] 1875 ※1 LUMO(eV) -4.96E-1~-4.96E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
33	CAS番号 121-32-4 3-エトキシ-4-ヒドロキシベンズアルデヒド 備考: 	魚類	使用可 87.6 mg/L	使用可 aldehydes 19.1 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 16.4 mg/L Phenols 63.9 mg/L Baseline Toxicity 349 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 16.3 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 235 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aldehydes (Mono) 33.2 mg/L ○ Phenols 15.7 mg/L Baseline Toxicity 190 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 16.4 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
	分子量 166.18 logP(KowWin) 1.546 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.15E+0 ※3 [予測値] 2867 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.88E-1~2.96E-1 ※5 Qc ※6					
34	官報公示整理:2-217 CAS番号 78-69-3 3,7-ジメチルオクタン-3-オール 備考: 	魚類	使用可 8.9mg/L	使用可 basesurface narcotics 16.6 mg/L	使用可 Neutral Organics 4.73 mg/L	使用可 ○Alcohols aliphatic 12.1 mg/L Neutral Organics 6.88 mg/L
		甲殻類	使用可 14.2mg/L	使用不可 basesurface narcotics 7.29 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3.11 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 9.36 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 3.36 mg/L
	分子量 158.29 logP(KowWin) 3.603 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.69E+0 ※3 [予測値] 188.9 ※1 LUMO(eV) 3.35E+0~3.47E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

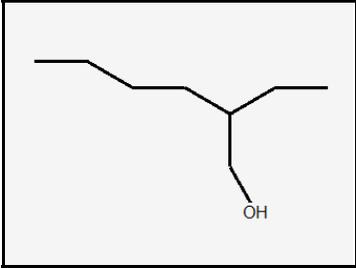
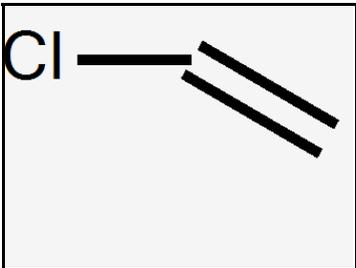
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
35	<b>旧3監:10</b> CAS番号 2, 2', 6, 6' -テトラブロモ-4, 4' -(プロパン-2, 2-ジイル)ジフェノール 備考: 	魚類	使用可 9.19 mg/L	使用不可 phenols and anilines 0.261 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Phenols, Poly 0.0230 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.00900 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amines aromatic or phenols2(ClogP) 3.62 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 7.87 mg/L	使用不可 phenols and anilines 1.02 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Phenols, Poly 0.0230 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.00900 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amines aromatic or phenols2(ClogP) 7.86 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
36	<b>旧3監:15</b> CAS番号 576-26-1 2, 6-ジメチルフェノール (別名2, 6-キシレノール) 備考: 	魚類	使用可 15.4 mg/L	使用不可 phenols and anilines 11.1 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Phenols 7.33 mg/L Baseline Toxicity 28.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 8.61 mg/L
		甲殻類	使用可 11.1 mg/L	使用可 phenols and anilines 7.62 mg/L	使用可 ○Phenols 2.89 mg/L Baseline Toxicity 17.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 3.59 mg/L

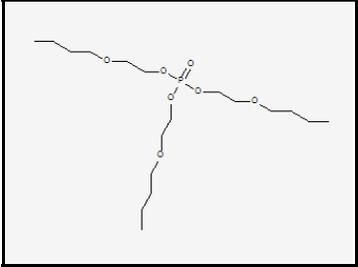
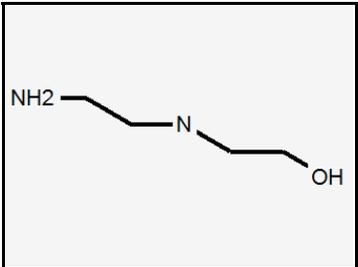
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
37	CAS番号 106-24-1  ゲラニオール  備考:   分子量 154.25    logP(KowWin) 3.47 ※2 対水溶解(mg/L) 255.8 ※1    logBCFmaxtox 2.59E+0 ※3 [予測値]    LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc 1.38E-2 ※6	魚類	使用可 22mg/L	使用不可 a,b-unsaturated alcohols 0.331 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Vinyl/Allyl Alcohols 1.80 mg/L Baseline Toxicity 6.06 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems2 1.31 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 10.8mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4.86 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Vinyl/Allyl Alcohols 0.283 mg/L Baseline Toxicity 3.94 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems2 2.87 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
38	CAS番号 124-63-0  メタンスルホニルクロリド  備考:   分子量 114.55    logP(KowWin) 1.273 ※2 対水溶解(mg/L) 8591 ※1    logBCFmaxtox 9.5E-1 ※3 [予測値]    LUMO(eV) -2.36E+0~-2.36E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 11mg/L	使用不可 Reactive unspecified 85.7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Acid Halides 16.1 mg/L Baseline Toxicity 423 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 halides1 2.57 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 34mg/L	使用不可 Reactive unspecified 180 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Acid Halides 201 mg/L Baseline Toxicity 225 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 halides1 1.51 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

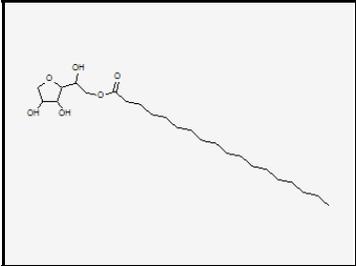
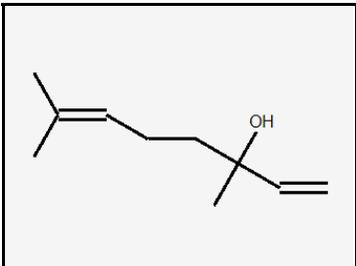
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
39	CAS番号 115-95-7  酢酸リナリル  備考:   分子量 196.29 logP(KowWin) 4.387 ※2 対水溶解(mg/L) 20.12 ※1 logBCFmaxtox 3.27E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 7.21E-1~1.21E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 11mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.58 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 1.06 mg/L ○ Vinyl/Allyl Esters 0.572 mg/L Baseline Toxicity 1.16 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 0.775 mg/L
		甲殻類	使用可 6.2mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.840 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 1.71 mg/L Vinyl/Allyl Esters 2.00 mg/L Baseline Toxicity 0.820 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 1.86 mg/L
40	CAS番号 24851-98-7  メチル(2-ペンチル-3-オキソシクロペンチル)アセテート  備考:   分子量 226.32 logP(KowWin) 2.975 ※2 対水溶解(mg/L) 91.72 ※1 logBCFmaxtox 2.22E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 6.75E-1~9.64E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 19 mg/L	使用可 esters 11.0 mg/L	使用可 ○Esters 8.16 mg/L Baseline Toxicity 24.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 8.88 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 8.25 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 20.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 15.3 mg/L Baseline Toxicity 15.4 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 10.7 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
41	CAS番号 <b>2216-51-5</b> (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 備考: 	魚類	使用可 15.6mg/L	使用可 basesurface narcotics 24.1 mg/L	使用可 Neutral Organics 7.38 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 18.5 mg/L Neutral Organics 10.4 mg/L
		甲殻類	使用可 26.6mg/L	使用不可 basesurface narcotics 11.4 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4.76 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 12.8 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) O Neutral Organics 4.64 mg/L
42	CAS番号 <b>89-78-1</b> Menthol 備考: 	魚類	使用可 17.6 mg/L	使用可 basesurface narcotics 24.1 mg/L	使用可 Neutral Organics 7.38 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 18.5 mg/L Neutral Organics 10.4 mg/L
		甲殻類	使用可 71 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 11.4 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4.76 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 12.8 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) O Neutral Organics 4.64 mg/L



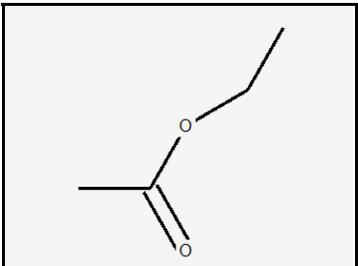
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
45	CAS番号 104-76-7 2-エチルヘキサン-1-オール 備考: 	魚類	使用可 28.2mg/L	使用可 basesurface narcotics 70.4 mg/L	使用可 Neutral Organics 23.6 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 55.2 mg/L Neutral Organics 30.3 mg/L
		甲殻類	使用可 39mg/L	使用可 basesurface narcotics 39.5 mg/L	使用可 Neutral Organics 14.3 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 27.6 mg/L Neutral Organics 10.3 mg/L
	分子量 130.23 logP(KowWin) 2.732 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.04E+0 ※3 [予測値] 1379 ※1 LUMO(eV) 3.37E+0~3.5E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
46	白通し番号:13 CAS番号 75-01-4 クロロエチレン 備考: 	魚類	使用可 210 mg/L	使用可 basesurface narcotics 93.6 mg/L	使用可 ○Vinyl/Allyl Halides 26.7 mg/L Baseline Toxicity 112 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 halides3 66.3 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 107 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Vinyl/Allyl Halides 21.1 mg/L Baseline Toxicity 61.4 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 halides3 29.1 mg/L
	分子量 62.5 logP(KowWin) 1.623 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.21E+0 ※3 [予測値] 5631 ※1 LUMO(eV) 8.56E-1~8.56E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
47	CAS番号 78-51-3 リン酸トリ-n-ブトキシエチル 備考: 	魚類	使用可 21mg/L	使用不可 Reactive unspecified 35.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 14.0 mg/L ○ Esters (phosphate) 3.88 mg/L Baseline Toxicity 41.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters phosphate 4.64 mg/L
		甲殻類	使用可 33mg/L	使用不可 Reactive unspecified 30.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 26.1 mg/L ○ Esters (phosphate) 0.00700 mg/L Baseline Toxicity 26.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters phosphate 0.0279 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 398.48 対水溶解(mg/L) [予測値] 1.963 ※1 logP(KowWin) 2.995 ※2 logBCFmaxtox 2.23E+0 ※3 LUMO(eV) 2.58E-1~1.04E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
48	官報公示整理:2-304 CAS番号 111-41-1 エチルアミノエタノールアミン(別名:N-(2-アミノエチル)-2-アミノエタノール) 備考: アミン類 	魚類	使用可 640mg/L	使用可 narcotic amines 13900 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 10300 mg/L Baseline Toxicity 435000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 primary amines aliphatic 8170 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 22mg/L	使用不可 Reactive unspecified 958000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 759 mg/L Baseline Toxicity 169000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 primary amines aliphatic 1680 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 104.15 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -2.126 ※2 logBCFmaxtox -1.59E+0 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

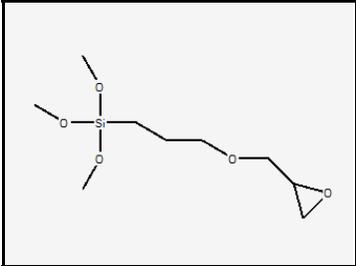
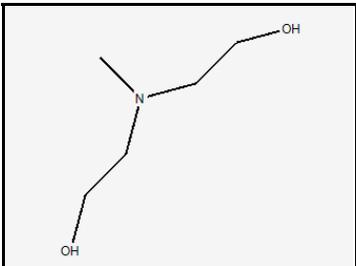
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
49	CAS番号 1338-41-6 ソルビタンモノオクタデカノアート 備考: 	魚類	使用可 > 13.7 mg/L	使用可 esters 0.288 mg/L	使用不可 Esters 0.232 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0740 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 0.134 mg/L ※P, ※f;判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 > 27.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0745 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters 0.311 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0610 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 0.144 mg/L ※P, ※f;判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
50	CAS番号 78-70-6 3,7-ジメチル-1,6-オクタジエン-3-オール 備考: 	魚類	使用可 28.8 mg/L	使用可 basesurface narcotics 9.15 mg/L	使用可 ○Vinyl/Allyl Alcohols 1.86 mg/L Baseline Toxicity 7.28 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 1.41 mg/L
		甲殻類	使用可 36.7 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 6.19 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Vinyl/Allyl Alcohols 0.290 mg/L Baseline Toxicity 4.70 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 3.07 mg/L

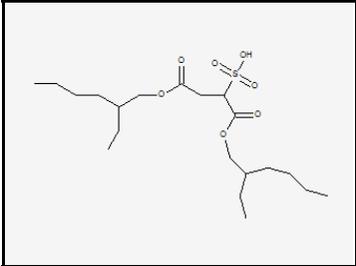
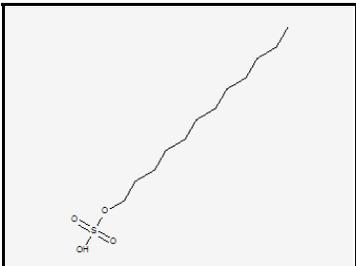


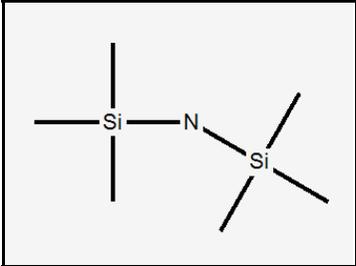
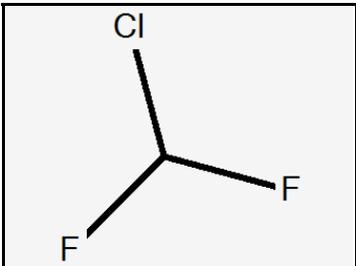


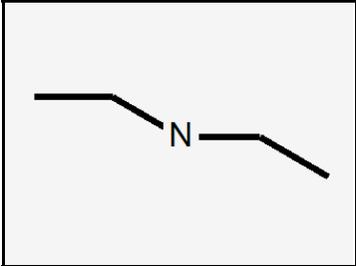
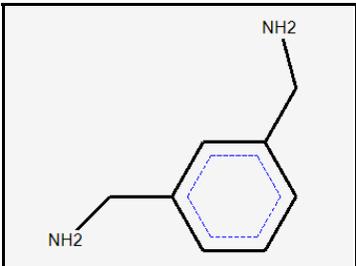
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
55	CAS番号 71-41-0 1-ペンタノール 備考: 	魚類	使用可 472 mg/L	使用可 basesurface narcotics 689 mg/L	使用可 Neutral Organics 288 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 585 mg/L Neutral Organics 303 mg/L
		甲殻類	使用可 341.21 mg/L	使用可 basesurface narcotics 565 mg/L	使用可 Neutral Organics 154 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 146 mg/L Neutral Organics 58.1 mg/L
	分子重 88.15 logP(KowWin) 1.332 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 9.94E-1 ※3 [予測値] 20890 ※1 LUMO(eV) 3.49E+0~3.6E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
56	官報公示整理:2-726 CAS番号 141-78-6 酢酸エチル 備考: 	魚類	使用可 > 75.6mg/L	使用可 esters 125 mg/L	使用可 Esters 54.3 mg/L Baseline Toxicity 758 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 90.7 mg/L
		甲殻類	使用可 2500mg/L	使用不可 Reactive unspecified 835 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 127 mg/L Baseline Toxicity 388 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 119 mg/L
	分子重 88.11 logP(KowWin) 0.864 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 6.45E-1 ※3 [予測値] 29930 ※1 LUMO(eV) 1.13E+0~1.15E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

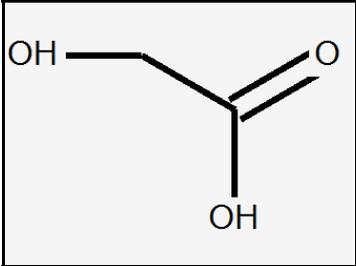
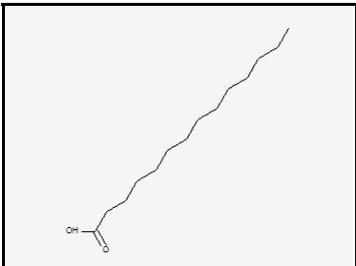
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
57	CAS番号 <b>9003-13-8</b>  Poly[oxy(methyl-1,2-ethanediy)], .alpha.-butyl-.omega.-hydroxy-  備考: n=1として予測    分子量 118.18 logP(KowWin) 0.567 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.23E-1 ※3 [予測値] 64470 ※1 LUMO(eV) 2.64E+0~3.E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 50 mg/L	使用可 basesurface narcotics 2710 mg/L	使用可 Neutral Organics 1880 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 3520 mg/L Neutral Organics 1770 mg/L
		甲殻類	使用可 95 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 3160 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 936 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 600 mg/L ※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) Neutral Organics 248 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
58	CAS番号 <b>124-07-2</b>  オクタン酸  備考:    分子量 144.22 logP(KowWin) 3.033 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.26E+0 ※3 [予測値] 495.9 ※1 LUMO(eV) 1.06E+0~1.14E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 51 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 16.7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 140 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 40.1 mg/L
		甲殻類	使用可 63 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 12.4 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 87.3 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 39.7 mg/L

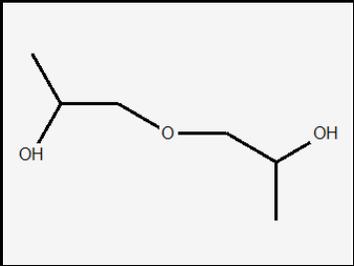
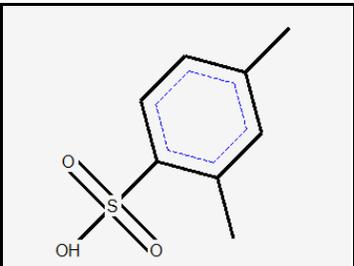
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
59	CAS番号 2530-83-8 2-[[3-(トリメトキシシリル)プロポキシ]メチル]オキシラン 備考: 	魚類	使用可 55 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 43300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Epoxides, mono 923 mg/L ○ Alkoxy Silanes 101 mg/L Baseline Toxicity 80600 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 epoxides(ClogP) 31.7 mg/L ※P, ※F,判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 473 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 100000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Epoxides, mono 5970 mg/L ○ Alkoxy Silanes 31.0 mg/L Baseline Toxicity 35000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 epoxides(ClogP) 95.9 mg/L ※P, ※F,判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
60	CAS番号 105-59-9 N-メチルジエタノールアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 1170mg/L	使用可 narcotic amines 6160 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 4580 mg/L Baseline Toxicity 137000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 6100 mg/L ※P,判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 230mg/L	使用不可 Reactive unspecified 268000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 363 mg/L Baseline Toxicity 56200 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 119 mg/L ※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)

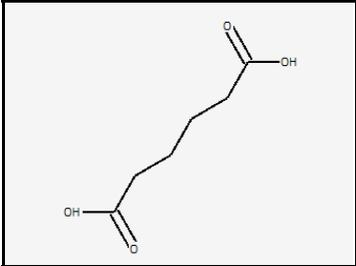
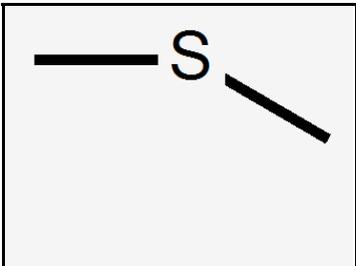
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
61	CAS番号 577-11-7 スルホコハク酸ジ-2-エチルヘキシルNa塩  備考: NaをHに置換し予測    分子量 422.58 logP(KowWin) 6.095 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.39E+0 ※3 [予測値] 0.001227 ※1 LUMO(eV) -1.42E+0~-8.48E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 68 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0830 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters-acid 2.29 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0730 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 0.693 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 19 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0404 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters-acid 3.07 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0600 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 24.3 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
62	CAS番号 151-21-3 ナトリウム=ドデカン-1-イル=スルファート  備考: NaをHに置換し、予測    分子量 266.4 logP(KowWin) 2.422 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.81E+0 ※3 [予測値] 163.7 ※1 LUMO(eV) -6.42E-1~-5.46E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 29mg/L	使用不可 Reactive unspecified 47.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 91.5 mg/L	使用不可 acids 206 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 7.8mg/L	使用不可 Reactive unspecified 54.9 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 54.0 mg/L	使用不可 acids 100 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)

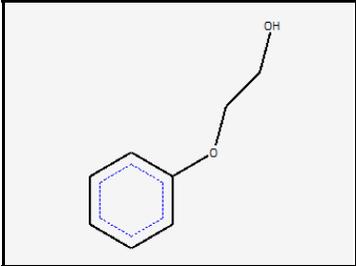
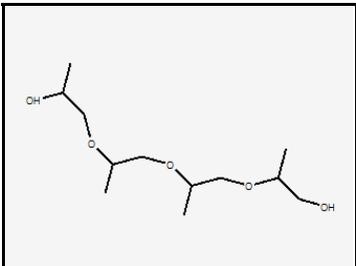
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
63	<b>官報公示整理:2-2044</b> CAS番号 <b>999-97-3</b> ヘキサメチルージシラザン(別名:1, 1, 1, 3, 3, 3-ヘキサメチルジシラザン) 備考: 	魚類	使用可 88mg/L	使用不可 Reactive unspecified 56.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 37.0 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 15.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
			甲殻類	使用可 80mg/L	使用不可 Reactive unspecified 41.9 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 22.2 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)
64	<b>CAS番号 75-45-6</b> クロロ(ジフルオロ)メタン 備考: 	魚類	使用可 777 mg/L	使用可 basesurface narcotics 334 mg/L	使用可 Neutral Organics 699 mg/L	使用不可 halides3 342 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 550 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 358 mg/L

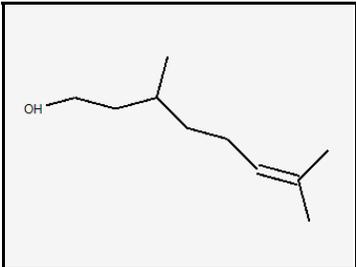
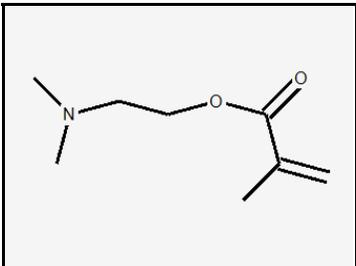
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
65	CAS番号 109-89-7  ジエチルアミン  備考: アミン類  	魚類	使用可  > 100mg/L	使用可  narcotic amines 113 mg/L	使用可  ○Aliphatic Amines 85.1 mg/L Baseline Toxicity 704 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  secondary or tertiary amines 94.1 mg/L
		甲殻類	使用可  56mg/L	使用不可  Reactive unspecified 1350 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  ○Aliphatic Amines 8.83 mg/L Baseline Toxicity 358 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  secondary or tertiary amines 36.0 mg/L
67	CAS番号 1477-55-0  メタキシリレンジアミン  備考: アミン類  	魚類	使用可  87.6mg/L	使用可  narcotic amines 575 mg/L	使用可  ○Aliphatic Amines 433 mg/L Baseline Toxicity 5180 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  primary amines aliphatic 501 mg/L
		甲殻類	使用可  15.2mg/L	使用不可  Reactive unspecified 4890 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  ○Aliphatic Amines 41.6 mg/L Baseline Toxicity 2480 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  primary amines aliphatic 62.8 mg/L
			分子量 73.14 対水溶解(mg/L) [予測値] 436900 ※1 logP(KowWin) 0.81 ※2 logBCFmaxtox 6.04E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6			
			分子量 136.2 対水溶解(mg/L) [予測値] 664200 ※1 logP(KowWin) 0.146 ※2 logBCFmaxtox 1.09E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6			

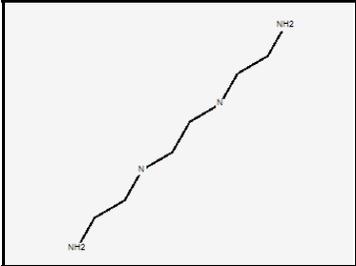
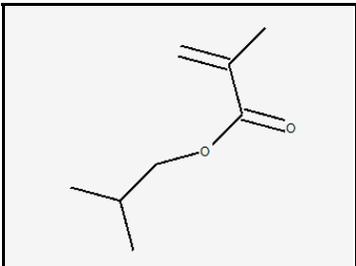
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
68	CAS番号 79-14-1 ヒドロキシ酢酸 備考: 	魚類	使用可 > 56 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 16400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 355000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems1 20.8 mg/L
		甲殻類	使用可 > 32 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 41300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 152000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems1 147 mg/L
70	CAS番号 67701-06-8 Fatty acids, C14-18 and C16-18-unsatd. 備考: C=18として予測 	魚類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.457 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 0.0110 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 acids 0.0210 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 0.178 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 0.0110 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 acids 6.36 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)

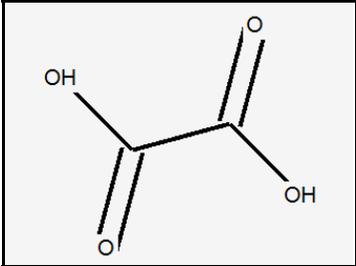
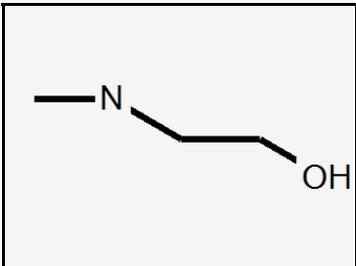
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
72	CAS番号 25265-71-8 ジプロピレングリコール 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 27100 mg/L	使用可 Neutral Organics 25800 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 42700 mg/L Neutral Organics 20500 mg/L
		甲殻類	> 109mg/L	使用不可 basesurface narcotics 46000 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 11500 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 4000 mg/L ※P, ※f:判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 1740 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 134.18 logP(KowWin) -0.639 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -4.77E-1 ※3 [予測値] 310700 ※1 LUMO(eV) 2.43E+0~3.15E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
73	CAS番号 1300-72-7 ナトリウム=ジメチルベンゼンスルホナート 備考: NaをHに置換し、 Benzenesulfonic acid, 2,4- dimethyl-として予測 	魚類	> 408 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3260 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 111000 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 9400 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	> 318.24 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7890 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 51900 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 250 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 186.23 logP(KowWin) -0.07 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -5.25E-2 ※3 [予測値] 58940 ※1 LUMO(eV) -8.46E-1~-7.39E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

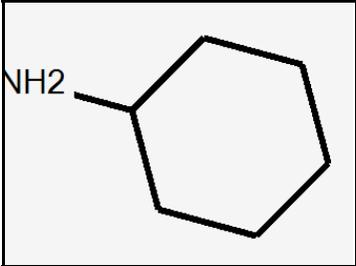
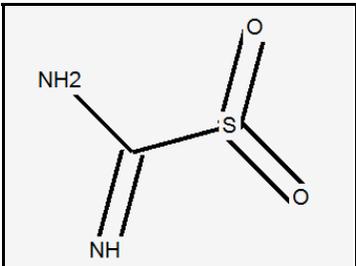
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
74	<b>官報公示整理:2-858</b> CAS番号 <b>124-04-9</b>  <b>アジピン酸</b>  備考: 	魚類	使用可 > 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2900 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 46900 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 4470 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 85.7mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4990 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 22600 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 169 mg/L
75	<b>官報公示整理:2-466</b> CAS番号 <b>75-18-3</b>  <b>硫化ジメチル</b>  備考: 	魚類	使用可 213mg/L	使用可 basesurface narcotics 360 mg/L	使用可 Neutral Organics 477 mg/L	使用不可 sulfides 469 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 29mg/L	使用不可 basesurface narcotics 497 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 245 mg/L	QSARモデルなし

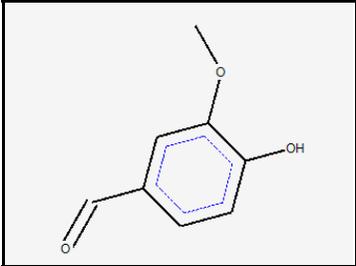
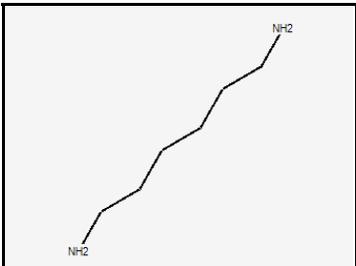
#	化学物質	対象	毒性値						
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9			
76	<b>官報公示整理:3-558</b> CAS番号 <b>122-99-6</b> エチレングリコールモノフェニルエーテル(別名: 2-フェノキシエタノール) 備考: 	魚類	使用可 344mg/L	使用可 basesurface narcotics 422 mg/L	使用可 Neutral Organics 730 mg/L	使用可 ethers with aromatic 446 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 743 mg/L			
		甲殻類	使用可 488mg/L	使用不可 basesurface narcotics 619 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 381 mg/L	使用不可 ethers with aromatic 20.6 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 129 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)			
			分子重	138.17	logP(KowWin)	1.1 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	8.21E-1 ※3			
			[予測値]	28180 ※1	LUMO(eV)	2.19E-1~4.48E-1 ※4			
					ODDI	※5			
					Qc	※6			
77	<b>CAS番号 25322-69-4</b> Poly[oxy(methyl-1,2-ethanediyl)], .alpha.-hydro-.omega.-hydroxy- 備考: n=4として予測 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 24500 mg/L	使用可 Neutral Organics 26700 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 45400 mg/L Neutral Organics 22000 mg/L			
		甲殻類	使用可 105.8 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 41100 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 12200 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 4900 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 2110 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)			
			分子重	250.34	logP(KowWin)	-0.352 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	-2.63E-1 ※3			
			[予測値]	47100 ※1	LUMO(eV)	1.99E+0~2.67E+0 ※4			
					ODDI	※5			
					Qc	※6			

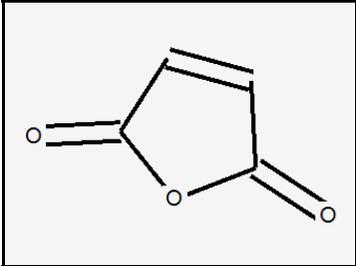
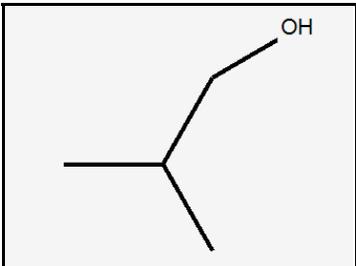
#	化学物質	対象	毒性値				
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9	
78	CAS番号 <b>106-22-9</b> <b>3, 7-ジメチルオクタ-6-エン-1-オール</b> 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 6.85 mg/L	使用可 Neutral Organics 5.15 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 13.2 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 7.45 mg/L	
		甲殻類	17.48mg/L	使用不可 basesurface narcotics 4.37 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3.38 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 9.92 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 3.57 mg/L	
			分子量	156.27	logP(KowWin)	3.555 ※2	
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	2.65E+0 ※3	
			[予測値]	105.5 ※1	LUMO(eV)	1.07E+0~1.39E+0 ※4	
					ODDI	※5	
					Qc	※6	
79	旧指定または旧2監通し番号 :1051 CAS番号 <b>2867-47-2</b> <b>2-(N,N-ジメチルアミノ)エチル=メタクリレート</b> 備考: 2-(ジメチルアミノ)エチル=メタクリレートを予測アミン類 	魚類	使用可 19.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 559 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 143 mg/L Methacrylates 152 mg/L Baseline Toxicity 1080 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 methacrylates 56.2 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)	
		甲殻類	33 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 879 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 15.1 mg/L Methacrylates 114 mg/L Baseline Toxicity 559 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 methacrylates 153 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)	
			分子量	157.21	logP(KowWin)	0.972 ※2	
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	7.25E-1 ※3	
			[予測値]	106100 ※1	LUMO(eV)	1.08E-2~5.16E-1 ※4	
					ODDI	※5	
					Qc	※6	

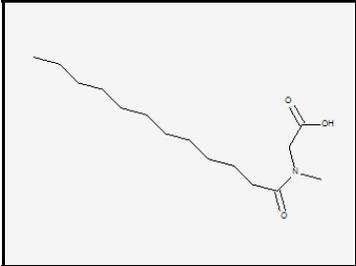
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
80	旧指定または旧2監通し番号 CAS番号 112-24-3 :982 トリエチレンテトラミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 570 mg/L	使用可 narcotic amines 43000 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 31700 mg/L Baseline Toxicity 1790000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 primary amines aliphatic 23100 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 31.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3990000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 2200 mg/L Baseline Toxicity 661000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 primary amines aliphatic 5310 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
81	CAS番号 97-86-9 イソブチル=メタクリラート 備考: 	魚類	使用可 20 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 19.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Methacrylates 8.55 mg/L Baseline Toxicity 28.9 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 methacrylates 7.59 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 23 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 19.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Methacrylates 6.96 mg/L Baseline Toxicity 17.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 methacrylates 19.7 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)

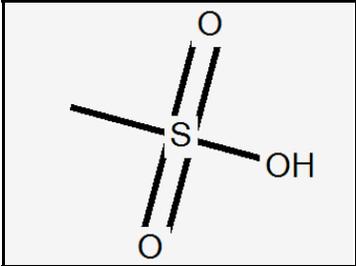
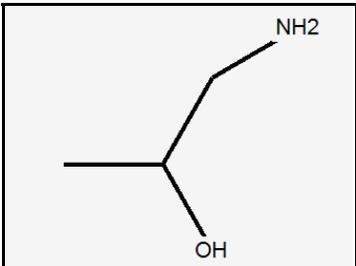
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
82	CAS番号 144-62-7  シュウ酸  備考: 	魚類	使用可 27 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 51200 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 168000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 56.1 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 15 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 174000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 67500 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 696 mg/L ※P, ※f;判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
	分子量 90.04 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -1.737 ※2 logBCFmaxtox -1.3E+0 ※3 LUMO(eV) 3.18E-3~7.16E-2 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
83	CAS番号 109-83-1  2-(メチルアミノ)エタノール  備考: アミン類 	魚類	使用可 100 mg/L	使用可 narcotic amines 2260 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 1680 mg/L Baseline Toxicity 41300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 2180 mg/L
		甲殻類	使用可 33 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 89500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 139 mg/L Baseline Toxicity 17500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 67.3 mg/L ※f;判定留意(麻醉作用を持つ部分構造を含む)
	分子量 75.11 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -1.146 ※2 logBCFmaxtox -8.55E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

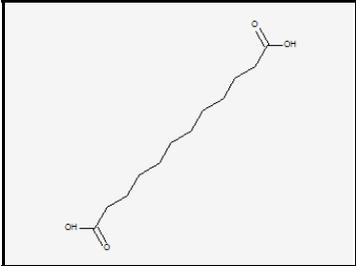
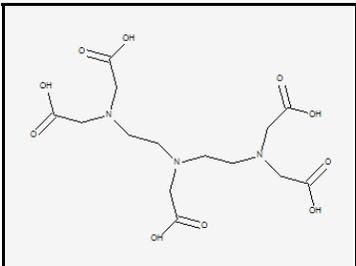
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
84	旧指定または旧2監通し番号 :1083 CAS番号 108-91-8 シクロヘキシルアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 narcotic amines 43.8 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 33.3 mg/L Baseline Toxicity 175 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 49.4 mg/L
		甲殻類	使用可 36.3 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 330 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 3.80 mg/L Baseline Toxicity 95.9 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 4.49 mg/L
			分子量 99.18	logP(KowWin) 1.631 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 63960 ※1	logBCFmaxtox 1.22E+0 ※3		
				LUMO(eV) ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
85	CAS番号 4189-44-0 二酸化チオ尿素 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 172000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 23400 mg/L Baseline Toxicity 1320000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 90400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 81 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 974000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 1620 mg/L Baseline Toxicity 486000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 5570 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
			分子量 108.12	logP(KowWin) -2.644 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1	logBCFmaxtox -1.97E+0 ※3		
				LUMO(eV) -1.59E+0~-1.56E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

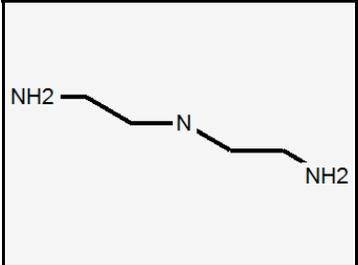
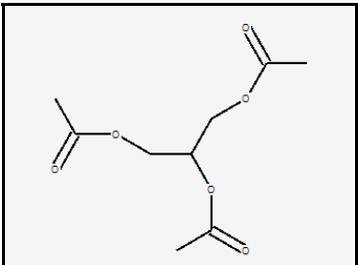
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
86	CAS番号 121-33-5  バニリン  備考:   分子重 152.15 logP(KowWin) 1.055 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 7.87E-1 ※3 [予測値] 6875 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.91E-1~2.96E-1 ※5 Qc ※6	魚類	使用可 57 mg/L	使用可 aldehydes 31.6 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 27.2 mg/L Phenols 138 mg/L Baseline Toxicity 882 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 25.9 mg/L
		甲殻類	使用可 36.79 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 619 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aldehydes (Mono) 70.3 mg/L ○ Phenols 27.3 mg/L Baseline Toxicity 459 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 27.5 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
87	旧指定または旧2監通し番号 :1019 CAS番号 124-09-4  ヘキサメチレンジアミン  備考: アミン類   分子重 116.21 logP(KowWin) 0.346 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.58E-1 ※3 [予測値] 534300 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 70.7 mg/L	使用可 narcotic amines 362 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 273 mg/L Baseline Toxicity 2920 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 326 mg/L
		甲殻類	使用可 27.2 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 6010 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 26.8 mg/L Baseline Toxicity 1420 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 39.2 mg/L

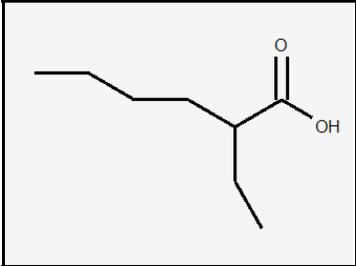
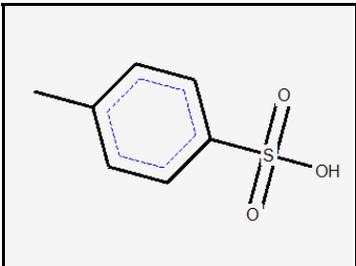
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
88	旧指定または旧2監通し番号 :1053 官報公示整理:2-1101 CAS番号 108-31-6  無水マレイン酸  備考: 	魚類	使用可 75mg/L	使用不可 Reactive unspecified 52.3 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 177 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acrylates 1.35 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 84mg/L	使用不可 Reactive unspecified 88.4 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 97.2 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acrylates 2.84 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
89	CAS番号 78-83-1  イソブタノール  備考: 	魚類	使用可 1330 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1680 mg/L	使用可 Neutral Organics 779 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 1490 mg/L Neutral Organics 756 mg/L
		甲殻類	使用可 1100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1620 mg/L	使用可 Neutral Organics 395 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 281 mg/L ※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) ○ Neutral Organics 115 mg/L

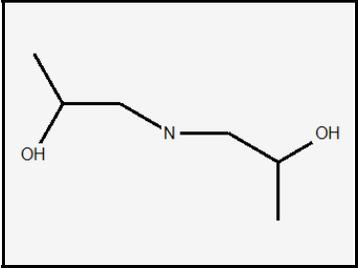
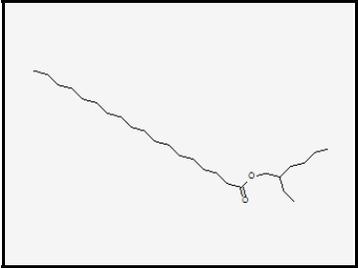
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
90	CAS番号 137-16-6 N-ラウロイルサルコシンNa塩 備考: NaをHに置換し、予測 	魚類	使用可 107 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3.47 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAmides -acid 25.6 mg/L Baseline Toxicity 2.90 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amides or imides 3.14 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 29.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2.06 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAmides -acid 10.7 mg/L Baseline Toxicity 2.00 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amides or imides 0.959 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
91	CAS番号 111-27-3 1-ヘキサノール 備考: 	魚類	使用可 97.2 mg/L	使用可 basesurface narcotics 315 mg/L	使用可 Neutral Organics 121 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 258 mg/L Neutral Organics 137 mg/L
		甲殻類	使用可 201 mg/L	使用可 basesurface narcotics 226 mg/L	使用可 Neutral Organics 67.6 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 82.2 mg/L Neutral Organics 32.0 mg/L

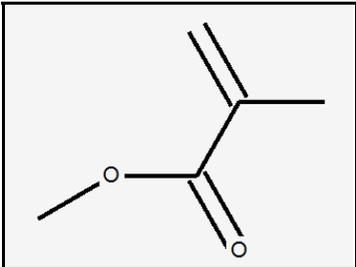
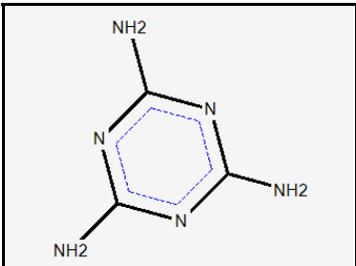
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
92	CAS番号 75-75-2 メタンスルホン酸 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 136000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 6800000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 234000 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	> 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 620000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 2580000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 421 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 96.1 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -2.382 ※2 logBCFmaxtox -1.78E+0 ※3 LUMO(eV) -7.08E-1~-7.08E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
93	CAS番号 78-96-6 1-アミノ-2-プロパノール 備考: アミン類 	魚類	使用可 2520mg/L	使用可 narcotic amines 2430 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 1810 mg/L Baseline Toxicity 45600 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 1680 mg/L
		甲殻類	108.82mg/L	使用不可 Reactive unspecified 104000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 149 mg/L Baseline Toxicity 19300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 282 mg/L
	分子量 75.11 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -1.195 ※2 logBCFmaxtox -8.91E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

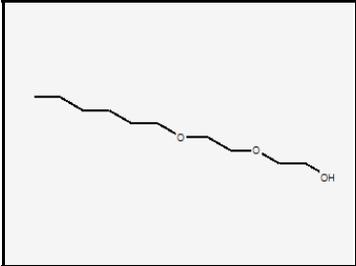
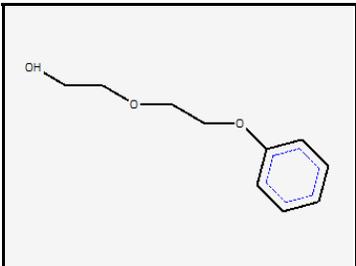
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
94	CAS番号 <b>693-23-2</b>  <b>ドデカン二酸</b>  備考:   分子量 230.31 logP(KowWin) 3.174 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.37E+0 ※3 [予測値] 146.4 ※1 LUMO(eV) 8.21E-1~1.08E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 18.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 167 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 50.5 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 13.7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 106 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 59.0 mg/L
95	CAS番号 <b>140-01-2</b>  <b>ペンタナトリウム=2, 2', 2'', 2''' - [[(カルボキシル)メチル]イミノ]ビス(エチレンニトリロ)]テトラアセタート</b>  備考: アミン類 NaをHに置換し予測   分子量 393.35 logP(KowWin) -4.906 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -3.66E+0 ※3 [予測値] 443300 ※1 LUMO(eV) 1.48E-1~6.86E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 1115mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.04e+7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 2.60e+7 mg/L Baseline Toxicity 5.15e+8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 4570000 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 245mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7.40e+8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 1390000 mg/L Baseline Toxicity 1.54e+8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 1120 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

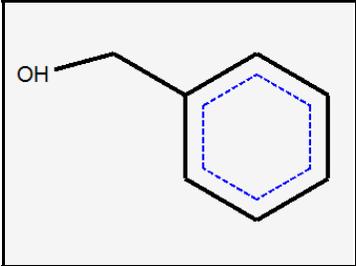
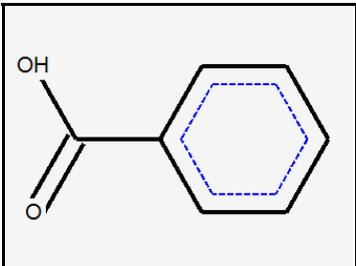
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
96	旧指定または旧2監通し番号 CAS番号 111-40-0 :382 官報公示整理:2-159  ジエチレントリアミン(別名 N-(2-アミノエチル)-1,2-エタンジアミン)  備考: アミン類  	魚類	使用可 322mg/L	使用可 narcotic amines 13900 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 10300 mg/L Baseline Toxicity 436000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 primary amines aliphatic 8160 mg/L ※P, ※F,判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 16mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1000000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 758 mg/L Baseline Toxicity 169000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 primary amines aliphatic 1680 mg/L ※P, ※F,判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 103.17 logP(KowWin) -2.132 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.59E+0 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
97	CAS番号 102-76-1  グリセリン=トリアセテート  備考:  	魚類	使用可 165.3mg/L	使用可 esters 486 mg/L	使用可 ○Esters 264 mg/L Baseline Toxicity 5290 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 487 mg/L
		甲殻類	使用可 380mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5120 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 653 mg/L Baseline Toxicity 2580 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 653 mg/L
	分子量 218.21 logP(KowWin) 0.363 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.71E-1 ※3 [予測値] 21520 ※1 LUMO(eV) 4.68E-1~1.09E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

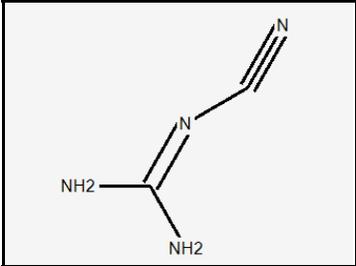
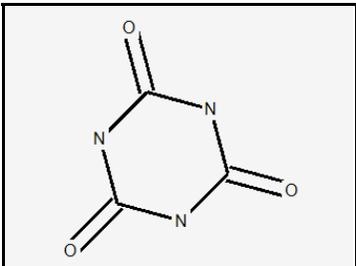
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
98	旧指定または旧2監通し番号 :1037 CAS番号 149-57-5 2-エチルヘキサン酸 備考: 	魚類	使用可 180 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 19.3 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 163 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 45.3 mg/L
		甲殻類	使用可 106 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 14.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 101 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 41.2 mg/L
99	CAS番号 657-84-1 p-トルエンスルホン酸ナトリウム 備考: NaをHに置換し予測 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 317000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 21800 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 23600 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 142000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 306 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

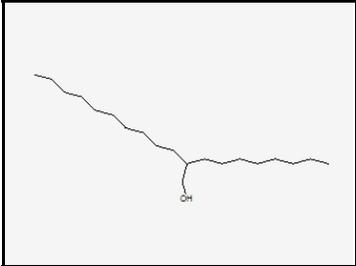
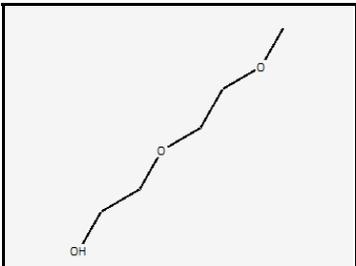
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
100	官報公示整理:2-309 CAS番号 110-97-4  ジイソプロパノールアミン  備考: アミン類    分子量 133.19 logP(KowWin) -0.878 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -6.55E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可  1466mg/L	使用可  narcotic amines 2670 mg/L	使用可  ○Aliphatic Amines 1990 mg/L Baseline Toxicity 42100 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  secondary or tertiary amines 2520 mg/L
		甲殻類	使用可  277.7mg/L	使用不可  Reactive unspecified 82400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  ○Aliphatic Amines 170 mg/L Baseline Toxicity 18300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  secondary or tertiary amines 110 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
101	CAS番号 91031-48-0  Fatty acids, C16-18, 2-ethylhexyl esters  備考: C=18として予測    分子量 396.7 logP(KowWin) 11.595 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.27E+0 ※3 [予測値] 0.0000004022 ※1 LUMO(eV) 1.17E+0~1.22E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用可  esters 162 mg/L	使用不可  Esters 0.000132 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 7.87e-7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  esters aliphatic 0.0000251 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	実測データなし	使用不可  Reactive unspecified 618 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  Esters 0.0000984 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.00000108 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  esters aliphatic 0.0000217 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)

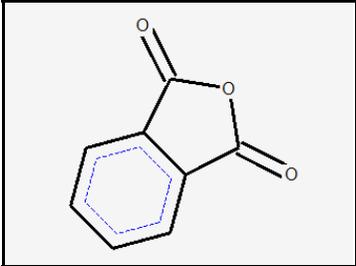
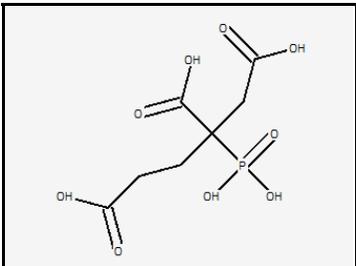
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
102	旧指定または旧2監通し番号 :1048 官報公示整理:2-1036 CAS番号 80-62-6  メタクリル酸メチル  備考: 	魚類	使用可 130mg/L	使用不可 Reactive unspecified 204 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Methacrylates 59.1 mg/L Baseline Toxicity 368 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 methacrylates 25.5 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 69mg/L	使用不可 Reactive unspecified 293 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Methacrylates 45.0 mg/L Baseline Toxicity 196 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 methacrylates 68.7 mg/L
103	官報公示整理:5-1024 CAS番号 108-78-1  メラミン  備考: 	魚類	使用可 > 3000mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7140 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Anilines (amino-meta) 2680 mg/L ○ Melamines 391 mg/L Baseline Toxicity 14300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amines aromatic or phenols3 17.8 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 200mg/L	使用不可 Reactive unspecified 15100 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (amino-meta) 6.23 mg/L Melamines 144 mg/L Baseline Toxicity 6500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols5 50.2 mg/L

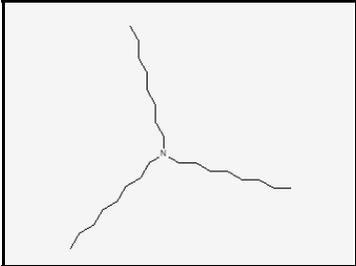
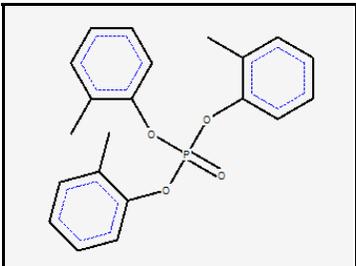
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
104	CAS番号 112-59-4 2-[2-(ヘキサン-1-イルオキシ)エトキシ]エタノール 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 971 mg/L	使用可 Neutral Organics 701 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 1410 mg/L Neutral Organics 732 mg/L
		甲殻類	370 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 990 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 372 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 343 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 137 mg/L
105	CAS番号 104-68-7 ジエチレングリコールモノフェニルエーテル 備考: 	魚類	432 mg/L	使用可 basesurface narcotics 935 mg/L	使用可 Neutral Organics 1700 mg/L	使用可 ethers with aromatic 1020 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 1660 mg/L
		甲殻類	906 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1480 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 865 mg/L	使用不可 ethers with aromatic 37.1 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 258 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)

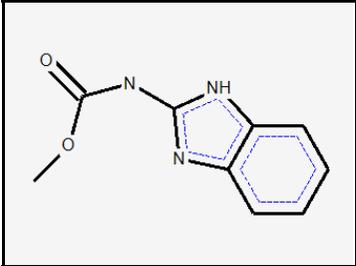
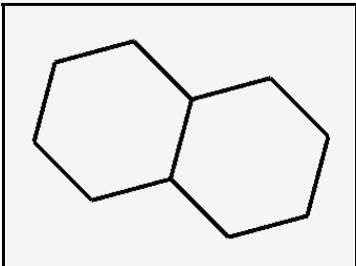
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
106	官報公示整理:3-1011 CAS番号 100-51-6 ベンジルアルコール 備考: 	魚類	使用可 460mg/L	使用可 basesurface narcotics 350 mg/L	使用可 ○Benzyl Alcohols 214 mg/L Baseline Toxicity 601 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Alcohols aliphatic 1190 mg/L Neutral Organics 609 mg/L
		甲殻類	使用可 55mg/L	使用不可 basesurface narcotics 515 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Benzyl Alcohols 158 mg/L Baseline Toxicity 313 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 alcohols aliphatic 260 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 105 mg/L
107	CAS番号 532-32-1 ナトリウム=ベンゾアート 備考: NaをHに置換し予測 	魚類	使用可 484 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 62.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1300 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 237 mg/L
		甲殻類	使用可 < 650 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 83.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 730 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 60.8 mg/L

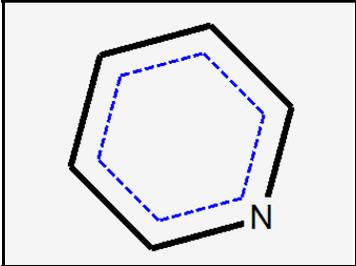
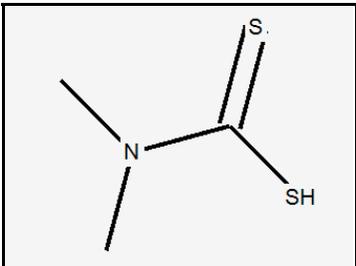
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
108	<b>官報公示整理:2-1694</b> CAS番号 <b>461-58-5</b> <b>ジシアンジアミド(別名:ジアノグアニジン)</b> 備考: NaをHに置換し予測 	魚類	使用可 > 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 20500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 2230 mg/L Baseline Toxicity 58000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 nitriles aliphatic 13700 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 42100 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			甲殻類	使用可 > 1000mg/L	使用不可 Reactive unspecified 59600 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 182 mg/L Baseline Toxicity 24400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
109	<b>官報公示整理:5-1037</b> CAS番号 <b>108-80-5</b> <b>イソシアヌル酸(別名:イソシアヌール酸)</b> 備考: 	魚類	使用可 > 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 64.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Triazines, Aromatic 72.0 mg/L Baseline Toxicity 117 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 39.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
			甲殻類	使用可 1000mg/L	使用不可 Reactive unspecified 80.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Triazines, Aromatic 34.7 mg/L Baseline Toxicity 66.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
	分子量 84.08 logP(KowWin) -1.256 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -9.37E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 1.33E-1~1.33E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
	分子量 129.08 logP(KowWin) 1.952 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.46E+0 ※3 [予測値] 1994 ※1 LUMO(eV) -2.83E-1~-2.83E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

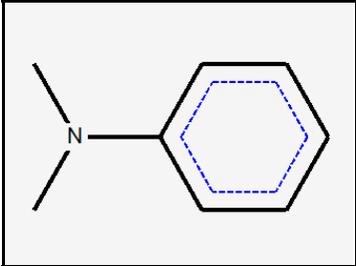
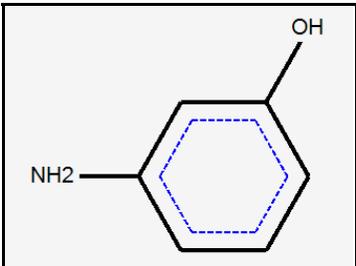
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
110	CAS番号 5333-42-6 2-オクタン-1-イルドデカン-1-オール 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 4.20 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.000275 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.00119 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.000821 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 1.37 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.000288 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.0112 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.00318 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 298.56 logP(KowWin) 8.625 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.48E+0 ※3 [予測値] 0.001745 ※1 LUMO(eV) 3.31E+0~3.44E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
111	CAS番号 111-77-3 2-(2-メトキシエトキシ)エタノール 備考: 	魚類	使用可 > 960mg/L	使用可 basesurface narcotics 62400 mg/L	使用可 Neutral Organics 71000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 111000 mg/L ※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) Neutral Organics 52100 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 930mg/L	使用不可 basesurface narcotics 127000 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 30100 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 7930 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 3550 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 120.15 logP(KowWin) -1.181 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -8.81E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 2.27E+0~2.77E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

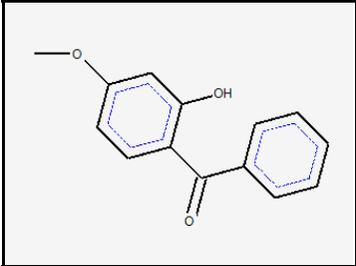
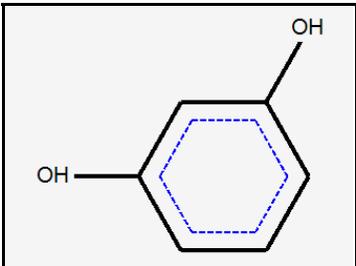
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
112	旧指定または旧2監通し番号 :1081 官報公示整理:3-1344 CAS番号 85-44-9 無水フタル酸 備考: 	魚類	使用可 > 99mg/L	使用不可 Reactive unspecified 36.4 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 106 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aromatic 18.5 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 71mg/L	使用不可 Reactive unspecified 52.7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 60.3 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aromatic 43.4 mg/L
113	CAS番号 37971-36-1 3-カルボキシ-3-ホスホノヘキサン二酸 備考: 	魚類	使用可 > 1042 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 62600 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 4290000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 phosphates 685000 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 294000 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 265 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 205000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1740000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 phosphates 10600 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 16400 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

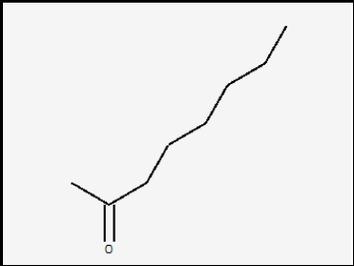
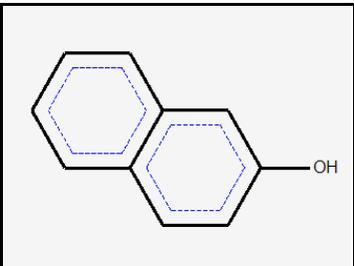
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
114	<b>旧3監:165</b> CAS番号 <b>トリオクチルアミン</b> 備考: アミン類 	魚類	実測データなし	<b>使用可</b> narcotic amines 21.1 mg/L	<b>使用不可</b> Aliphatic Amines 0.000221 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.00000917 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用不可</b> secondary or tertiary amines 0.000114 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	0.026mg/L	<b>使用不可</b> Reactive unspecified 58.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用不可</b> Aliphatic Amines 0.0000697 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0000113 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用不可</b> secondary or tertiary amines 9.37 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 353.68 logP(KowWin) 10.352 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.2E+0 ※3 [予測値] 0.00008659 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
115	<b>旧指定または旧2監通し番号</b> <b>:1086 旧3監:276</b> CAS番号 <b>りん酸トリトリル</b> 備考: 	魚類	0.84 mg/L	<b>使用不可</b> Reactive unspecified 0.160 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用不可</b> Esters 0.143 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Esters (phosphate) 0.241 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0380 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用不可</b> phosphates 0.0693 mg/L ※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) Neutral Organics 0.0819 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	0.25 mg/L	<b>使用不可</b> Reactive unspecified 0.0815 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用不可</b> Esters 0.187 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Esters (phosphate) 0.000327 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0320 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	<b>使用不可</b> phosphates 0.337 mg/L ※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) Neutral Organics 0.124 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 368.37 logP(KowWin) 6.343 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.8E+0 ※3 [予測値] 0.2073 ※1 LUMO(eV) -2.53E-1 ※4 ODDI 0.E+0 ※5 Qc 0.E+0 ※6					

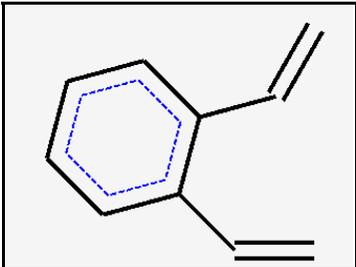
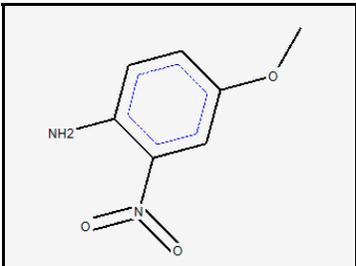
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
116	<b>旧3監:247</b> CAS番号 カルペンダジム (別名メチル=ベンゾイミダゾール-2-イルカルバマート) 備考: 	魚類	使用可 0.41 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 219 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OImidazoles 15.3 mg/L Carbamate Esters 56.4 mg/L Baseline Toxicity 396 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	QSARモデルなし
		甲殻類	使用可 0.35 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 287 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OImidazoles 3.49 mg/L Carbamate Esters 48.6 mg/L Baseline Toxicity 216 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	QSARモデルなし
117	<b>旧3監:237</b> CAS番号 ビスクロ[4.4.0]デカン 備考: 	魚類	使用可 0.37mg/L	使用可 basesurface narcotics 5.08 mg/L	使用可 Neutral Organics 1.21 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 1.79 mg/L Neutral Organics 1.92 mg/L
		甲殻類	使用可 0.23mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1.85 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.841 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 0.843 mg/L Neutral Organics 1.20 mg/L

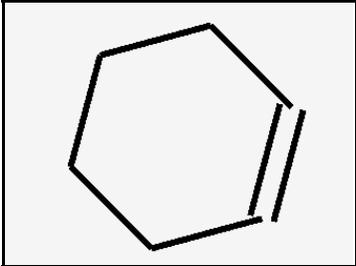
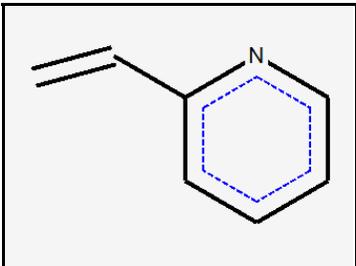
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
118	旧指定または旧2監通し番号 CAS番号 110-86-1 :1095 ピリジン 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 406 mg/L	使用可 Neutral Organics 770 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 210 mg/L
		甲殻類	使用可 180 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 657 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 391 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 69.1 mg/L
119	旧3監:172 CAS番号 ナトリウム=N, N-ジメチルジチオカルバマート 備考: NaをHに置換し予測 	魚類	使用可 2.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 667 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Thiocarbamate,Di(free acid) 2.95 mg/L Baseline Toxicity 1490 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 barbitals or thiols other 3550 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.67 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1110 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Thiocarbamate,Di(free acid) 0.510 mg/L Baseline Toxicity 750 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	QSARモデルなし

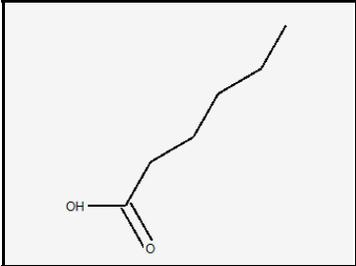
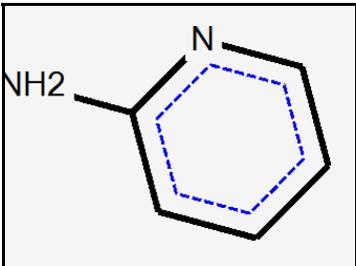
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
121	<b>旧3監:187</b> CAS番号  <b>N, N-ジメチルアニリン</b>  備考: アミン類 	魚類	使用可 53.7 mg/L	使用可 basesurface narcotics 58.6 mg/L	使用可 Neutral Organics 70.0 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols5 25.2 mg/L
		甲殻類	使用可 5 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 60.2 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 40.4 mg/L	使用不可 amines aromatic or phenols5 4.51 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			分子量 121.18	logP(KowWin) 2.171 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 1058 ※1	logBCFmaxtox 7.41E-1 ※3		
				LUMO(eV) 7.06E-1 ※4		
				ODDI 0.E+0 ※5		
				Qc 0.E+0 ※6		
122	<b>旧指定または旧2監通し番号:903 旧3監:11</b> CAS番号  <b>m-アミノフェノール</b>  備考: アミン類 	魚類	使用可 121 mg/L	使用可 phenols and anilines 602 mg/L	使用可 Anilines (Unhindered) 260 mg/L Phenols 409 mg/L ○ Phenol Amines 22.3 mg/L Baseline Toxicity 3380 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 386 mg/L
		甲殻類	使用可 0.447 mg/L	使用不可 phenols and anilines 111 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.811 mg/L Phenols 56.4 mg/L Phenol Amines 1.21 mg/L Baseline Toxicity 1630 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols1 0.721 mg/L
			分子量 109.13	logP(KowWin) 0.245 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 72470 ※1	logBCFmaxtox -9.81E-1 ※3		
				LUMO(eV) 5.4E-1 ※4		
				ODDI 0.E+0 ※5		
				Qc 0.E+0 ※6		

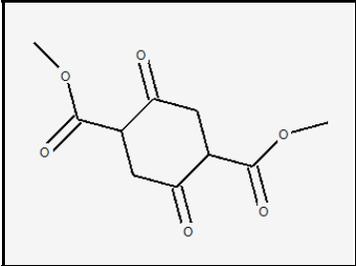
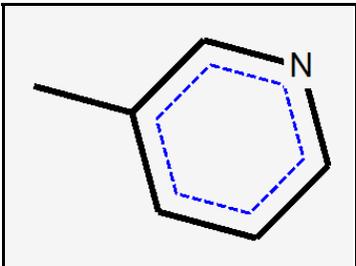
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
123	<b>旧3監:107</b> CAS番号 <b>131-57-7</b>  (2-ヒドロキシ-4-メキシフェニル)(フェニル)メタン  備考: 	魚類	使用可 3.8 mg/L	使用可 phenols and anilines 2.72 mg/L	使用可 OPhenols 2.75 mg/L Baseline Toxicity 8.01 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 3.51 mg/L
		甲殻類	使用可 1.9 mg/L	使用不可 phenols and anilines 3.53 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OPhenols 1.63 mg/L Baseline Toxicity 5.24 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 2.34 mg/L
124	<b>CAS番号 108-46-3</b>  <b>レゾルシン</b>  備考: 	魚類	使用可 26.8 mg/L	使用可 phenols and anilines 136 mg/L	使用可 OPhenols, Poly 22.2 mg/L Baseline Toxicity 669 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 105 mg/L
		甲殻類	使用可 1 mg/L	使用可 phenols and anilines 41.0 mg/L	使用可 OPhenols, Poly 256 mg/L Baseline Toxicity 347 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols1 0.560 mg/L

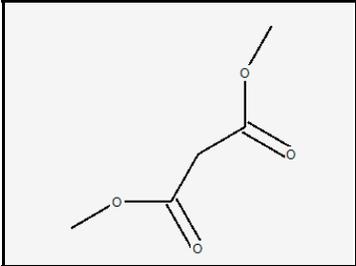
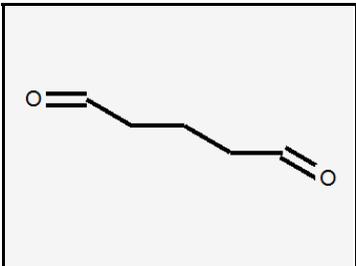
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
125	CAS番号 111-13-7  2-オクタノン  備考:   分子量 128.22 logP(KowWin) 2.22 ※2 対水溶解(mg/L) 884.2 ※1 logBCFmaxtox 1.66E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 8.69E-1~9.15E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 36 mg/L	使用可 basesurface narcotics 63.0 mg/L	使用可 Neutral Organics 66.8 mg/L	使用可 Oketones 63.8 mg/L Neutral Organics 79.8 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 60.7 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 38.7 mg/L	使用可 Neutral Organics 22.1 mg/L
126	CAS番号 135-19-3  2-ナフトール  備考:   分子量 144.17 logP(KowWin) 2.689 ※2 対水溶解(mg/L) 1512 ※1 logBCFmaxtox 2.01E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -3.44E-1~-3.44E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 4 mg/L	使用可 phenols and anilines 7.79 mg/L	使用可 OPhenols 7.50 mg/L Baseline Toxicity 28.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 8.87 mg/L
		甲殻類	使用可 5.3 mg/L	使用不可 phenols and anilines 6.28 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OPhenols 3.07 mg/L Baseline Toxicity 17.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 3.86 mg/L

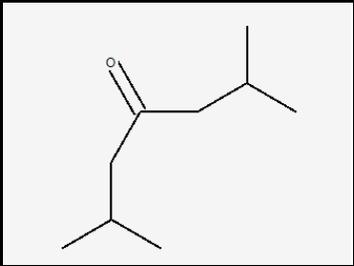
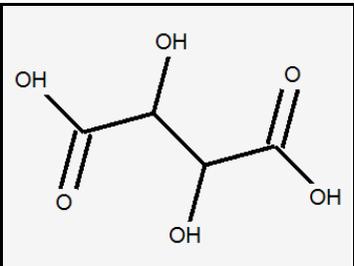
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
127	旧3監:62 CAS番号 ジビニルベンゼン 備考: 	魚類	使用可 4.16mg/L	使用可 basesurface narcotics 2.24 mg/L	使用可 Neutral Organics 2.60 mg/L	使用不可 hydrocarbons aromatic 4.31 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 1.87mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1.60 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1.74 mg/L	使用不可 hydrocarbons aromatic 1.65 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
	分子量 130.19 対水溶解(mg/L) [予測値] 52.5 ※1 logP(KowWin) 3.797 ※2 logBCFmaxtox 2.83E+0 ※3 LUMO(eV) -7.56E-2~4.21E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
128	CAS番号 96-96-8 2-ニトロ-p-アニシジン 備考: アミン類 	魚類	使用可 41 mg/L	使用可 phenols and anilines 18.2 mg/L	使用可 ○Anilines (Unhindered) 20.4 mg/L Baseline Toxicity 112 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols3 8.51 mg/L
		甲殻類	使用可 4.4 mg/L	使用不可 phenols and anilines 11.8 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 1.20 mg/L Baseline Toxicity 64.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols3 1.50 mg/L
	分子量 168.15 対水溶解(mg/L) [予測値] 1383 ※1 logP(KowWin) 2.099 ※2 logBCFmaxtox 1.57E+0 ※3 LUMO(eV) -8.89E-1~-8.79E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

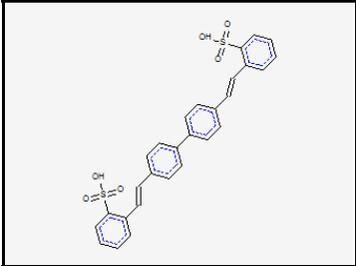
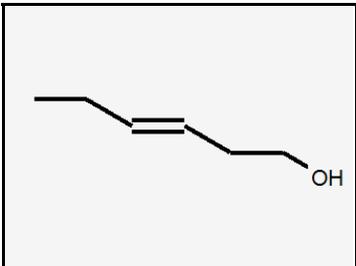
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
129	<b>旧3監:8</b> シクロヘキセン CAS番号 備考: 	魚類	使用可 5.8mg/L	使用可 basesurface narcotics 12.3 mg/L	使用可 Neutral Organics 9.26 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 9.10 mg/L Neutral Organics 12.3 mg/L
		甲殻類	使用可 2.1mg/L	使用不可 basesurface narcotics 8.93 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 5.74 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 2.07 mg/L Neutral Organics 4.61 mg/L
	分子量 82.15 logP(KowWin) 2.961 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.21E+0 ※3 [予測値] 135.9 ※1 LUMO(eV) 1.35E+0~1.35E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
130	<b>旧指定または旧2監通し番号:435 旧3監:128</b> 2-ビニルピリジン CAS番号 備考: 	魚類	使用可 6.5mg/L	使用不可 Reactive unspecified 84.4 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 158 mg/L	使用可 conjugated systems1 0.949 mg/L
		甲殻類	使用可 9.5mg/L	使用不可 Reactive unspecified 112 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 87.6 mg/L	使用可 conjugated systems1 0.662 mg/L
	分子量 105.14 logP(KowWin) 1.707 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.27E+0 ※3 [予測値] 5460 ※1 LUMO(eV) -2.57E-1~-1.77E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

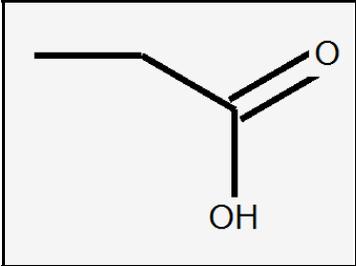
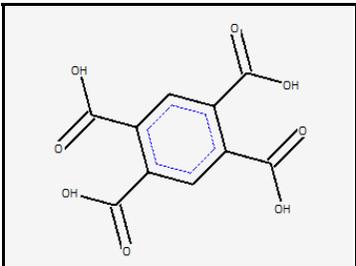
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
131	CAS番号 142-62-1  ヘキサン酸  備考:   分子量 116.16 logP(KowWin) 2.051 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.53E+0 ※3 [予測値] 5898 ※1 LUMO(eV) 1.03E+0~1.07E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 88 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 83.7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 858 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 167 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 82.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 490 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 52.8 mg/L
132	旧指定または旧2監通し番号 436 官報公示整理5-724 CAS番号 504-29-0  2-アミノピリジン  備考: アミン類   分子量 94.12 logP(KowWin) 0.53 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.95E-1 ※3 [予測値] 47270 ※1 LUMO(eV) 3.22E-1~3.22E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 11mg/L	使用不可 Reactive unspecified 875 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 142 mg/L Baseline Toxicity 1620 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols3 9.13 mg/L
		甲殻類	使用可 35mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1480 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.695 mg/L Baseline Toxicity 802 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols5 16.1 mg/L

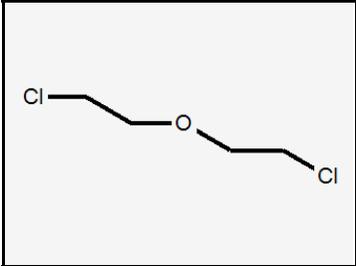
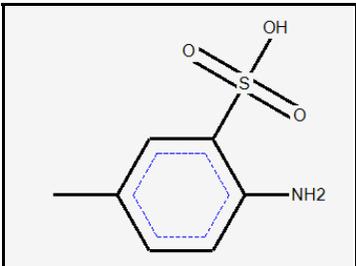
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
133	CAS番号 <b>6289-46-9</b> ジメチル=2,5-ジオキソシクロヘキサン-1,4-ジカルボキシレート 備考: 	魚類	使用可 > 500 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 166000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 6520 mg/L Baseline Toxicity 718000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 19400 mg/L ※P, ※f判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 660000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 20800 mg/L Baseline Toxicity 282000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 28500 mg/L ※P, ※f判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
134	CAS番号 <b>108-99-6</b> 3-メチルピリジン 備考: 	魚類	使用可 144 mg/L	使用可 basesurface narcotics 171 mg/L	使用可 Neutral Organics 292 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 111 mg/L
		甲殻類	使用可 34 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 237 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 156 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 37.5 mg/L

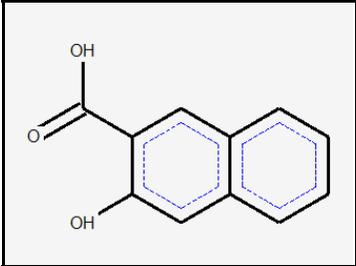
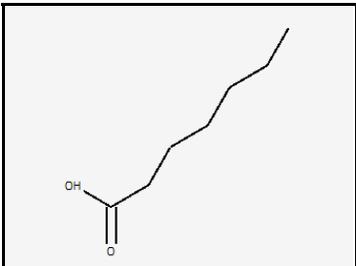
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
135	CAS番号 108-59-8 マロン酸ジメチル 備考: 	魚類	使用可 21mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3830 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 292 mg/L Baseline Toxicity 8110 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 591 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 1000mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7800 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 759 mg/L Baseline Toxicity 3800 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 806 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
136	旧指定または旧2監通し番号 :1033 CAS番号 111-30-8 グルタルアルデヒド 備考: 	魚類	使用可 8.8 mg/L	使用可 aldehydes 103 mg/L	使用可 OAldehydes (Poly) 11.2 mg/L Baseline Toxicity 7500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 68.1 mg/L
		甲殻類	使用可 8.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7770 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAldehydes (Poly) 16.4 mg/L Baseline Toxicity 3480 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 83.8 mg/L
			分子量 132.12 logP(KowWin) -0.086 ※2 対水溶解(mg/L) 99510 ※1 logBCFmaxtox -6.44E-2 ※3 [予測値] LUMO(eV) 2.83E-1~7.43E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6			
			分子量 100.12 logP(KowWin) -0.182 ※2 対水溶解(mg/L) 167200 ※1 logBCFmaxtox -1.36E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI 2.82E-1~2.89E-1 ※5 Qc ※6			

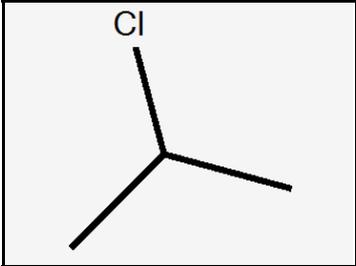
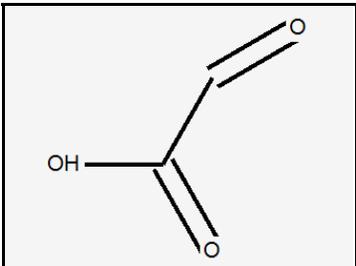
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
137	CAS番号 <b>108-83-8</b> 2,6-ジメチル-4-ヘプタン 備考: 	魚類	使用可 30 mg/L	使用可 basesurface narcotics 37.3 mg/L	使用可 Neutral Organics 36.4 mg/L	使用可 Oketones 37.4 mg/L Neutral Organics 45.6 mg/L
		甲殻類	使用可 37.2 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 32.3 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 21.7 mg/L	使用可 Neutral Organics 14.5 mg/L
分子量 142.24 logP(KowWin) 2.565 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.91E+0 ※3 [予測値] 528.8 ※1 LUMO(eV) 9.06E-1~9.52E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
138	CAS番号 <b>87-69-4</b> 酒石酸 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 21200 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 612000 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems1 37.9 mg/L
		甲殻類	使用可 93.313 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 58900 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 263000 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems1 254 mg/L
分子量 150.09 logP(KowWin) -1.002 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -7.47E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) -2.91E-2~3.46E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

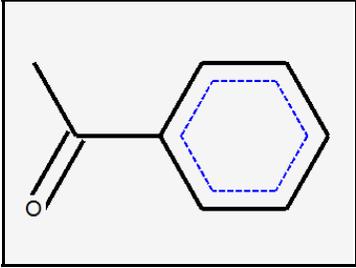
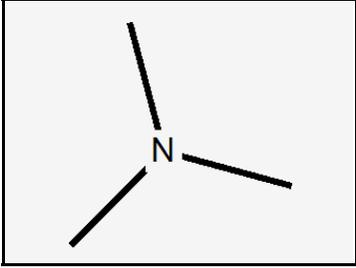
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
139	CAS番号 <b>27344-41-8</b> ジナトリウム=2, 2'- (ビフェニル-4, 4'-ジイルジエテン-2, 1-ジイル)ビス(ベンゼンスルホナート) 備考: NaをHに置換し予測 	魚類	使用可 74.8mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.03 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 15.6 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 8.61 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 20.9mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.673 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 11.4 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 60.4 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
140	CAS番号 <b>928-96-1</b> cis-3-ヘキセン-1-オール 備考: 	魚類	使用可 381 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 165 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 185 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 386 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 202 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 185 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 101 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 111 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 43.5 mg/L

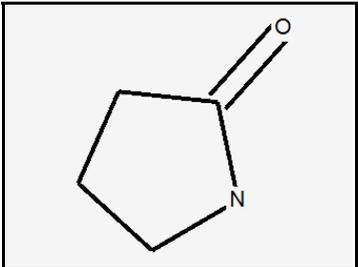
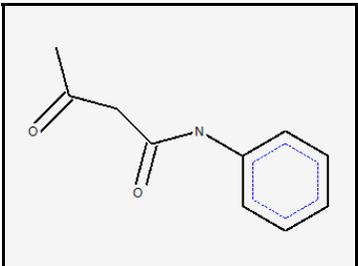
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
141	CAS番号 79-09-4  プロピオン酸  備考:   分子量 74.08 logP(KowWin) 0.578 ※2 対水溶解(mg/L) 173600 ※1 logBCFmaxtox 4.31E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.05E+0~1.1E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 51 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 855 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 11500 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 1260 mg/L
		甲殻類	使用可 22.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1280 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 5740 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 71.5 mg/L
142	CAS番号 89-05-4  1, 2, 4, 5-ベンゼンテトラカルボン酸  備考:   分子量 254.15 logP(KowWin) 0.149 ※2 対水溶解(mg/L) 16750 ※1 logBCFmaxtox 1.11E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) -2.03E+0~-1.92E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1790 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 96000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 8880 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 63 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4910 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 46000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 306 mg/L

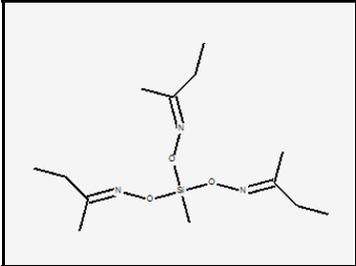
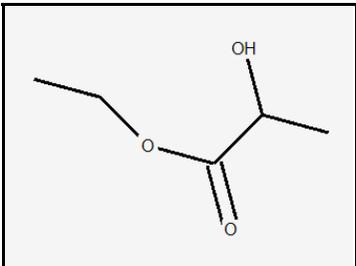
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
143	CAS番号 111-44-4 2, 2'-ジクロロジエチルエーテル 備考: 	魚類	使用可 600 mg/L	使用可 basesurface narcotics 249 mg/L	使用可 OHalo Ethers 149 mg/L Baseline Toxicity 294 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 85.3 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 410 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 287 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Baseline Toxicity 160 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 24.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
			分子量 143.01	logP(KowWin) 1.557 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 6435 ※1	logBCFmaxtox 1.16E+0 ※3		
				LUMO(eV) 9.2E-1 ~ 1.4E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
144	CAS番号 88-44-8 2-アミノ-5-メチルベンゼンスルホン酸 備考: アミン類 	魚類	使用可 > 10 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 57400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OHAnilines (Unhindered)-acid 77300 mg/L Baseline Toxicity 230000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amines aromatic or phenols5 12400 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
		甲殻類	使用可 21 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 201000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OHAnilines (Unhindered)-acid 14.5 mg/L Baseline Toxicity 94200 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amines aromatic or phenols5 217 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
			分子量 187.21	logP(KowWin) -1.535 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 10380 ※1	logBCFmaxtox -1.15E+0 ※3		
				LUMO(eV) -5.67E-1 ~ -5.54E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

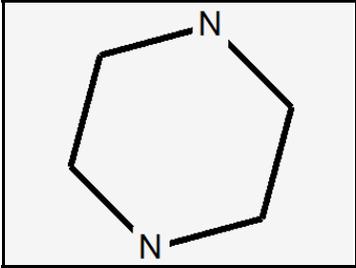
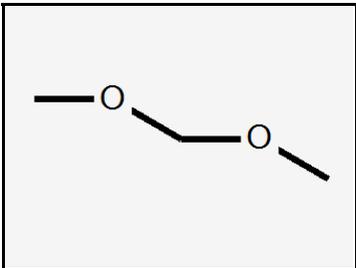
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
145	CAS番号 92-70-6 <b>β-ヒドロキシナフトエ酸</b> 備考:  分子量 188.18    logP(KowWin) 3.421 ※2 対水溶解(mg/L) [予測値] 474.1 ※1    logBCFmaxtox 2.55E+0 ※3 LUMO(eV) -9.83E-1~-9.42E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 68 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4.48 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OPhenols-acid 27.2 mg/L Baseline Toxicity 8.19 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 4.51 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 33 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4.10 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OPhenols-acid 15.4 mg/L Baseline Toxicity 5.30 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 2.49 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
146	CAS番号 111-14-8 <b>n-ヘプタン酸</b> 備考:  分子量 130.19    logP(KowWin) 2.542 ※2 対水溶解(mg/L) [予測値] 1955 ※1    logBCFmaxtox 1.9E+0 ※3 LUMO(eV) 1.02E+0~1.07E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 74.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 37.3 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 348 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 82.4 mg/L
		甲殻類	使用可 72 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 32.0 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 208 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 46.1 mg/L

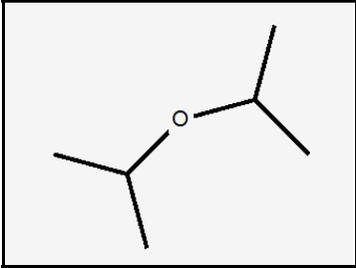
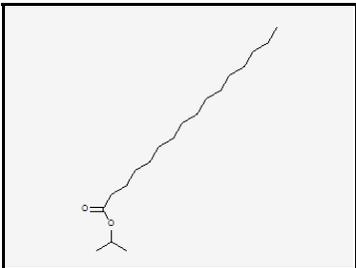
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
147	CAS番号 75-29-6  2-クロロプロパン  備考:   分子量 78.54 logP(KowWin) 1.995 ※2 対水溶解(mg/L) 3138 ※1 logBCFmaxtox 1.49E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.41E+0~1.41E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 95.9mg/L	使用可 basesurface narcotics 73.9 mg/L	使用可 Neutral Organics 65.2 mg/L	使用可 halides3 42.6 mg/L
		甲殻類	使用可 103mg/L	使用不可 basesurface narcotics 69.6 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 37.0 mg/L	使用可 halides3 18.0 mg/L
148	CAS番号 298-12-4  グリオキシル酸  備考:   分子量 74.04 logP(KowWin) -1.403 ※2 対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logBCFmaxtox -1.05E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -9.51E-1~-8.44E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 15100 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 256 mg/L Baseline Toxicity 69200 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 30.6 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 51 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 54200 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 2250 mg/L Baseline Toxicity 28700 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 287 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

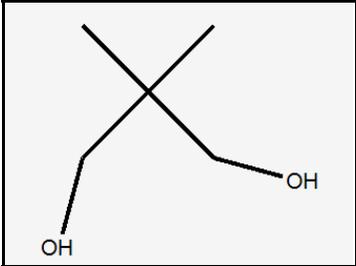
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
149	CAS番号 98-86-2  アセトフェノン  備考:   分子量 120.15 logP(KowWin) 1.674 ※2 対水溶解(mg/L) 4484 ※1 logBCFmaxtox 1.25E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -3.54E-1~1.37E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 155 mg/L	使用可 basesurface narcotics 98.4 mg/L	使用可 Neutral Organics 194 mg/L	使用可 Oketones 164 mg/L Neutral Organics 214 mg/L
		甲殻類	使用可 528 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 134 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 107 mg/L	使用可 Neutral Organics 47.2 mg/L
150	旧指定または旧2監通し番号 :1017 CAS番号 75-50-3  トリメチルアミン  備考: アミン類   分子量 59.11 logP(KowWin) 0.039 ※2 対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logBCFmaxtox 2.88E-2 ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 narcotic amines 294 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 221 mg/L Baseline Toxicity 2800 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 260 mg/L
		甲殻類	使用可 28 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5720 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 20.9 mg/L Baseline Toxicity 1330 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 36.9 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)

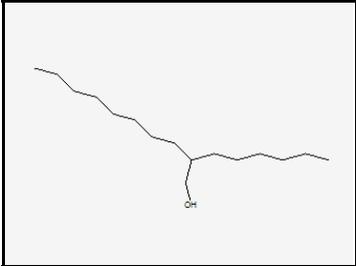
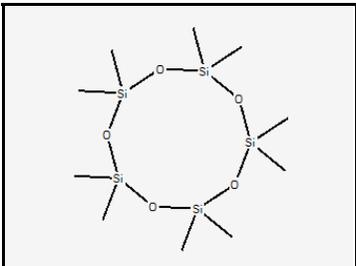
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
153	CAS番号 <b>616-45-5</b> <b>2-ピロリドン</b> 備考: 	魚類	使用可 6782 mg/L	使用可 basesurface narcotics 6380 mg/L	使用可 ○Amides 1150 mg/L Baseline Toxicity 8430 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amides or imides 1310 mg/L
		甲殻類	使用可 > 500 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 11400 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Amides 3700 mg/L Baseline Toxicity 3870 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amides or imides 1260 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
分子量 85.11 logP(KowWin) -0.317 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -2.37E-1 ※3 [予測値] 679700 ※1 LUMO(eV) 1.51E+0~1.51E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
154	CAS番号 <b>102-01-2</b> <b>アセト酢酸アニリド</b> 備考: 	魚類	使用可 297 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 549 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Amides 271 mg/L Baseline Toxicity 1130 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amides or imides 315 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 116 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 877 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Amides 472 mg/L Baseline Toxicity 587 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amides or imides 215 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
分子量 177.2 logP(KowWin) 1.008 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 7.52E-1 ※3 [予測値] 7832 ※1 LUMO(eV) -1.6E-1~1.63E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

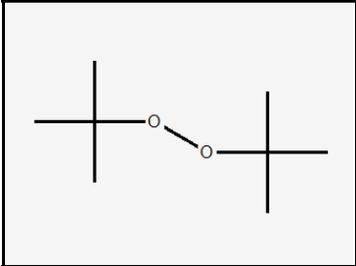
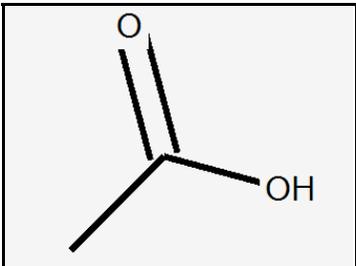
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
155	CAS番号 <b>22984-54-9</b> メチルトリス(エチルメチルケトオキシム)シラン 備考: 	魚類	使用可 > 120 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 13.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 0.0000229 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 0.000114 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 > 120 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.22 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 0.0000268 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 0.000638 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
			分子量 301.46	logP(KowWin) 9.833 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 2.59E+0 ※3		
			[予測値] 0.00004823 ※1	LUMO(eV) 6.8E-1~9.99E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
156	CAS番号 <b>687-47-8</b> 乳酸エチル 備考: 	魚類	使用可 320 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4440 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 297 mg/L Baseline Toxicity 8860 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 10.9 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 683 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9020 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 781 mg/L Baseline Toxicity 4110 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 36.9 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			分子量 118.13	logP(KowWin) -0.183 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox -1.37E-1 ※3		
			[予測値] 472800 ※1	LUMO(eV) 4.7E-1~1.17E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

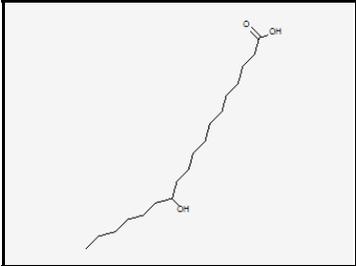
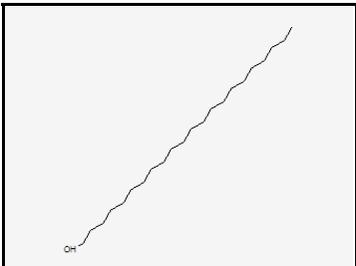
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
157	旧指定または旧2監通し番号 :438 官報公示整理:5-953 CAS番号 110-85-0 ピペラジン 備考: アミン類 	魚類	使用可 > 100mg/L	使用可 narcotic amines 1530 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 1140 mg/L Baseline Toxicity 23100 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 1440 mg/L
		甲殻類	使用可 106mg/L	使用不可 Reactive unspecified 49700 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 98.3 mg/L Baseline Toxicity 10100 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 69.4 mg/L
			分子量 86.14	logP(KowWin) -0.799 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1	logBCFmaxtox -5.96E-1 ※3		
				LUMO(eV) ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
158	CAS番号 109-87-5 ジメトキシメタン 備考: 	魚類	使用可 6990 mg/L	使用可 basesurface narcotics 6760 mg/L	使用可 Neutral Organics 5850 mg/L	使用可 ○ethers aliphatic 6490 mg/L Neutral Organics 4950 mg/L
		甲殻類	使用可 > 1200 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 10100 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2710 mg/L	使用不可 Neutral Organics 505 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
			分子量 76.1	logP(KowWin) -0.195 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 132900 ※1	logBCFmaxtox -1.45E-1 ※3		
				LUMO(eV) 2.46E+0~2.97E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

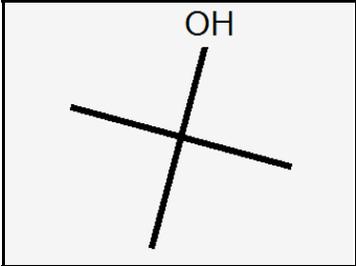
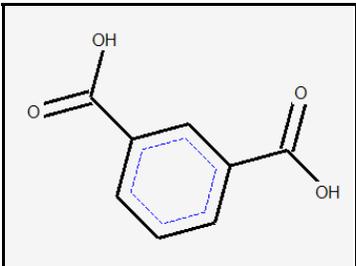
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
159	CAS番号 108-20-3 イソプロピルエーテル 備考: 	魚類	使用可 786 mg/L	使用可 basesurface narcotics 217 mg/L	使用可 Neutral Organics 107 mg/L	使用可 Oethers aliphatic 254 mg/L Neutral Organics 121 mg/L
		甲殻類	使用可 190 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 168 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 59.9 mg/L	使用不可 Neutral Organics 29.2 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			分子量 102.18	logP(KowWin) 1.884 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 1.41E+0 ※3		
			[予測値] 5800 ※1	LUMO(eV) 2.85E+0~2.91E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
160	CAS番号 142-91-6 イソプロピル=ヘキサデカノアート 備考: 	魚類	使用可 > 10000 mg/L	使用可 esters 0.749 mg/L	使用不可 Esters 0.0100 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.000724 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 0.00386 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 0.54 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters 0.0110 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.000726 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 0.00381 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			分子量 298.51	logP(KowWin) 8.157 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 3.82E+0 ※3		
			[予測値] 0.001354 ※1	LUMO(eV) 1.23E+0~1.28E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

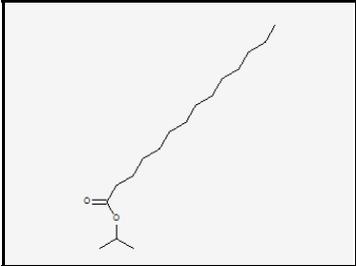
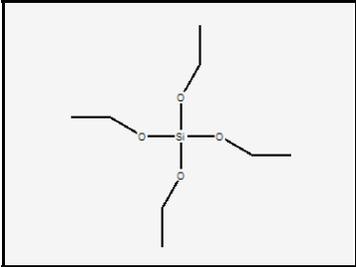
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
162	CAS番号 126-30-7 2, 2-ジメチル-1, 3-プロパンジオール 備考: 	魚類	使用可 ≥ 1000mg/L	使用可 basesurface narcotics 6230 mg/L	使用可 Neutral Organics 3820 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 6860 mg/L Neutral Organics 3400 mg/L
		甲殻類	使用可 > 1000mg/L	使用不可 basesurface narcotics 7560 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1830 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 957 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 402 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
163	白通し番号:3967 CAS番号 112-92-5 オクタデカン-1-オール 備考: 	魚類	使用可 > 0.4mg/L	使用可 basesurface narcotics 0.797 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.00163 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.00643 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.00428 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 0.203 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.00157 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.0384 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.0114 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)

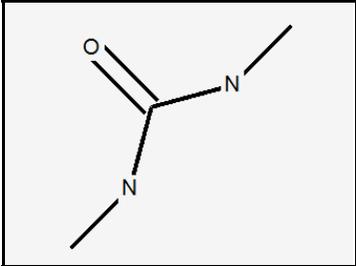
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
164	CAS番号 2425-77-6 2-ヘキシルデカン-1-オール 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 0.255 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.0130 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.0458 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.0292 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	> 0.035mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.0563 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.0110 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.162 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.0504 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 242.45 logP(KowWin) 6.661 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.51E+0 ※3 [予測値] 0.1727 ※1 LUMO(eV) 3.31E+0~3.46E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
165	CAS番号 541-02-6 2, 2, 4, 4, 6, 6, 8, 8, 10, 10-デカメチルシクロ ペンタシロキサン 備考: 	魚類	> 0.016 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.422 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.00143 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.00371 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 0.139 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.00140 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.0105 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
	分子量 370.78 logP(KowWin) 7.933 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.19E+0 ※3 [予測値] 0.01419 ※1 LUMO(eV) 1.57E+0~1.7E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

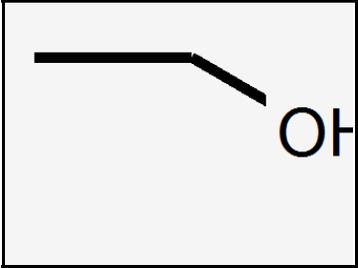
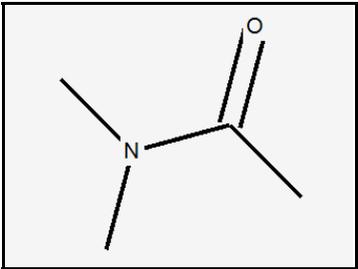
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
166	CAS番号 110-05-4  ジーtert-ブチルペルオキシド  備考: 	魚類	使用可 > 160mg/L	使用不可 Reactive unspecified 12.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Baseline Toxicity 6.01 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 3.35 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 > 73.1mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7.02 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OPeroxy Acids 1.07 mg/L Baseline Toxicity 3.90 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 1.87 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
167	CAS番号 127-08-2  カリウム＝アセタート  備考: KをHIに置換し予測 	魚類	使用可 > 992.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1720 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 25800 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 2330 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 919 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2960 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 12300 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 74.5 mg/L
分子量 146.23    logP(KowWin) 3.448 ※2 対水溶解(mg/L)    logBCFmaxtox 2.57E+0 ※3 [予測値] 89.51 ※1    LUMO(eV) 2.24E+0~2.25E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
分子量 60.05    logP(KowWin) 0.087 ※2 対水溶解(mg/L)    logBCFmaxtox 6.48E-2 ※3 [予測値] 475900 ※1    LUMO(eV) 1.02E+0~1.02E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

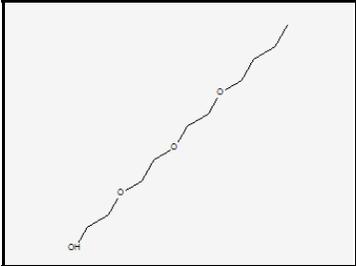
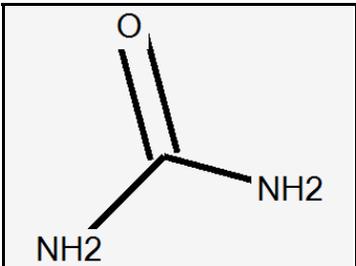
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
168	CAS番号 106-14-9 12-ヒドロキシステアリン酸 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 0.121 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 0.272 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.0936 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 0.0592 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	> 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0395 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 0.232 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.291 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 0.0918 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 300.49 logP(KowWin) 6.406 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.49E+0 ※3 [予測値] 0.3315 ※1 LUMO(eV) 8.77E-1~1.39E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
169	CAS番号 661-19-8 1-ドコサノール 備考: 	魚類	> 1000 mg/L	使用可 basesurface narcotics 33.3 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.0000339 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.000164 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.000118 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 14.6 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.0000391 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.00260 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.000704 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 326.61 logP(KowWin) 9.681 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.7E+0 ※3 [予測値] 0.0001496 ※1 LUMO(eV) 3.36E+0~3.53E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
170	旧指定または旧2監通し番号 CAS番号 75-65-0 :703 2-メチルプロパン-2-オール(別名:tert-ブチルアルコール) 備考: 	魚類	使用可 > 120 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1760 mg/L	使用可 Neutral Organics 842 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 1600 mg/L Neutral Organics 812 mg/L
		甲殻類	使用可 > 110 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1720 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 425 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 296 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 121 mg/L
	分子量 74.12 logP(KowWin) 0.73 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 5.45E-1 ※3 [予測値] 217500 ※1 LUMO(eV) 3.44E+0~3.44E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
172	官報公示整理3-1332 CAS番号 121-91-5 イソフタル酸 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 84.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 2260 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 393 mg/L
		甲殻類	使用可 > 952mg/L	使用不可 Reactive unspecified 127 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1260 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 87.8 mg/L
	分子量 166.13 logP(KowWin) 1.756 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.31E+0 ※3 [予測値] 2451 ※1 LUMO(eV) -1.11E+0~-1.07E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

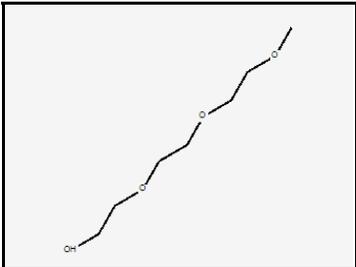
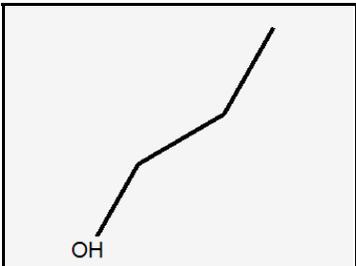
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
173	CAS番号 110-27-0  イソプロピル=テトラデカノアート  備考:   分子量 270.46 logP(KowWin) 7.175 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.4E+0 ※3 [予測値] 0.01354 ※1 LUMO(eV) 1.22E+0~1.29E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可  > 1000mg/L	使用可  esters 0.209 mg/L	使用不可  Esters 0.0340 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.00500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  esters aliphatic 0.0160 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可  > 0.05mg/L	使用不可  Reactive unspecified 0.0501 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  Esters 0.0410 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.00500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  esters aliphatic 0.0164 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
174	CAS番号 78-10-4  テトラエトキシシラン  備考:   分子量 208.33 logP(KowWin) 0.036 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.7E-2 ※3 [予測値] 36910 ※1 LUMO(eV) 7.73E-1~1.18E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可  > 245mg/L	使用不可  Reactive unspecified 5900 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  ○Alkoxy Silanes 33.0 mg/L Baseline Toxicity 9930 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  Unclassified 1710 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可  > 75mg/L	使用不可  Reactive unspecified 10700 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可  ○Alkoxy Silanes 19.7 mg/L Baseline Toxicity 4700 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  Unclassified 278 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)

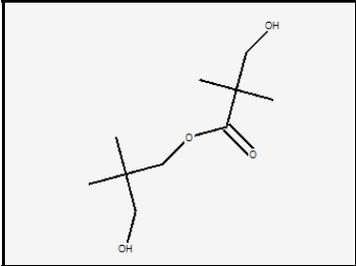
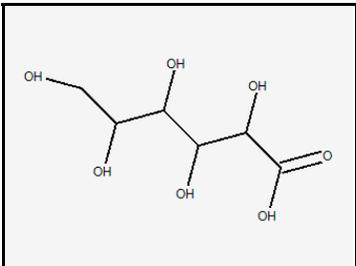
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
177	官報公示整理:2-1734 CAS番号 96-31-1 1,3-ジメチル尿素 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 11700 mg/L	使用可 ○Substituted Ureas 3620 mg/L Baseline Toxicity 16400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 2260 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	> 500mg/L	使用不可 basesurface narcotics 22900 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Substituted Ureas 3360 mg/L Baseline Toxicity 7320 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 289 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
	分子量 88.11 logP(KowWin) -0.623 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -4.65E-1 ※3 [予測値] 16150 ※1 LUMO(eV) 1.5E+0~1.63E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
178	CAS番号 112-34-5 2-(2-ブトキシエトキシ)エタノール 備考: 	魚類	使用可 1300mg/L	使用可 basesurface narcotics 5240 mg/L	使用可 Neutral Organics 4560 mg/L	使用可 ○Alcohols aliphatic 8300 mg/L Neutral Organics 4130 mg/L
		甲殻類	2850mg/L	使用不可 basesurface narcotics 7050 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2210 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 1230 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 516 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 162.23 logP(KowWin) 0.292 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.18E-1 ※3 [予測値] 71920 ※1 LUMO(eV) 2.23E+0~2.73E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

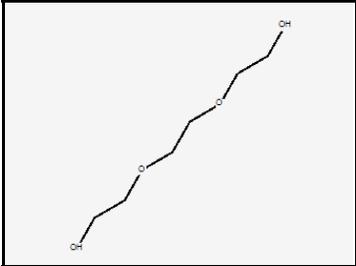
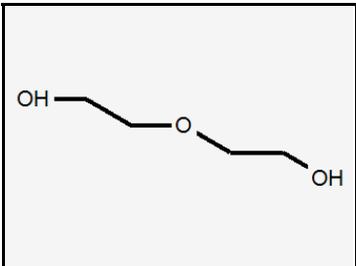
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
179	官報公示整理:2-202 CAS番号 64-17-5  エタノール  備考: 	魚類	使用可  > 100mg/L	使用可  basesurface narcotics 5890 mg/L	使用可  Neutral Organics 3170 mg/L	使用可  Alcohols aliphatic 5520 mg/L Neutral Organics 2700 mg/L
		甲殻類	使用可  5463.9mg/L	使用可  basesurface narcotics 7260 mg/L	使用可  Neutral Organics 1480 mg/L	使用不可  alcohols aliphatic 661 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 282 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
			分子量 46.07	logP(KowWin) -0.141 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox -1.05E-1 ※3		
			[予測値] 792100 ※1	LUMO(eV) 3.57E+0~3.57E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
180	旧指定または旧2監通し番号 :1039 CAS番号 127-19-5  N, N-ジメチルアセトアミド  備考: 	魚類	使用可  ≥ 1500mg/L	使用可  basesurface narcotics 6530 mg/L	使用可  OAmides 1560 mg/L Baseline Toxicity 12200 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  amides or imides 1760 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可  > 1000mg/L	使用不可  basesurface narcotics 13800 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可  OAmides 5390 mg/L Baseline Toxicity 5510 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可  amides or imides 1770 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
			分子量 87.12	logP(KowWin) -0.485 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox -3.62E-1 ※3		
			[予測値] 574700 ※1	LUMO(eV) 7.64E-1~1.44E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

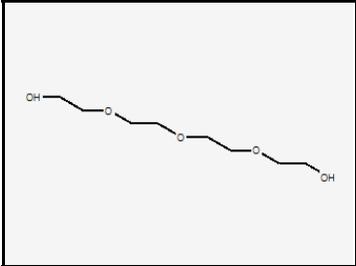
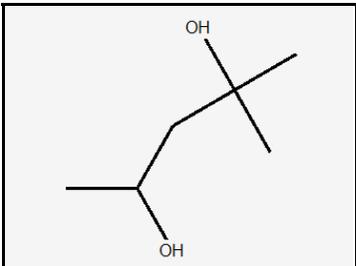
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
181	CAS番号 143-22-6 トリエチレングリコールモノブチルエーテル 備考: 	魚類	使用可 2400 mg/L	使用可 basesurface narcotics 10300 mg/L	使用可 Neutral Organics 10200 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 18100 mg/L Neutral Organics 8900 mg/L
		甲殻類	使用可 2210 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 15500 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4830 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 2340 mg/L ※P, ※f:判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 992 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 206.28 対水溶解(mg/L) [予測値] 126900 ※1 logP(KowWin) 0.018 ※2 logBCFmaxtox 1.33E-2 ※3 LUMO(eV) 2.04E+0~2.73E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
182	官報公示整理:2-1732 CAS番号 57-13-6 尿素 備考: 	魚類	使用可 17500mg/L	使用可 basesurface narcotics 47200 mg/L	使用不可 Baseline Toxicity 76900 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 7680 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 > 10000mg/L	使用不可 basesurface narcotics 119000 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Baseline Toxicity 31500 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 702 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
	分子量 60.06 対水溶解(mg/L) [予測値] 425900 ※1 logP(KowWin) -1.555 ※2 logBCFmaxtox -1.16E+0 ※3 LUMO(eV) 1.58E+0~1.58E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

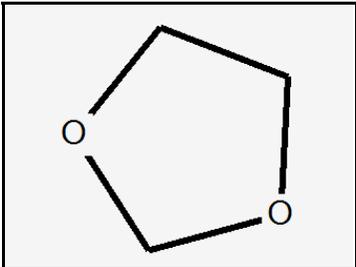
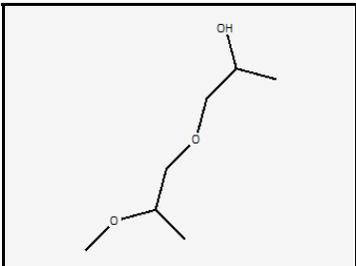


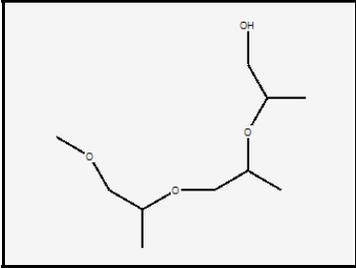
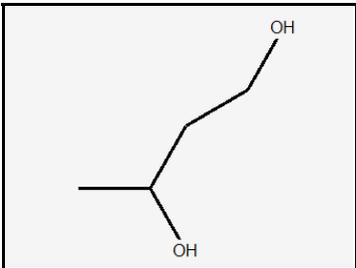
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
185	官報公示整理:2-442 CAS番号 112-35-6 トリエチレングリコールモノメチルエーテル 備考: 	魚類	使用可 > 10000mg/L	使用可 basesurface narcotics 130000 mg/L	使用可 Neutral Organics 171000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 260000 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP適用範囲外,麻酔作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 121000 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 500mg/L	使用不可 basesurface narcotics 296000 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 70600 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 16200 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 7340 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 164.2 logP(KowWin) -1.456 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.09E+0 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 2.04E+0~2.68E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
186	CAS番号 71-23-8 1-プロパノール 備考: 	魚類	使用可 4555mg/L	使用可 basesurface narcotics 3100 mg/L	使用可 Neutral Organics 1500 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 2740 mg/L Neutral Organics 1370 mg/L
		甲殻類	使用可 3025mg/L	使用可 basesurface narcotics 3310 mg/L	使用可 Neutral Organics 730 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 420 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 175 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 60.1 logP(KowWin) 0.35 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.61E-1 ※3 [予測値] 271500 ※1 LUMO(eV) 3.6E+0~3.63E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

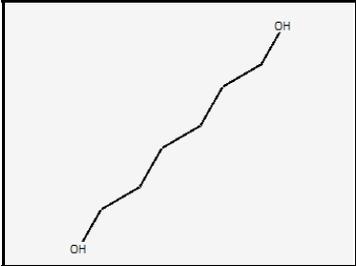
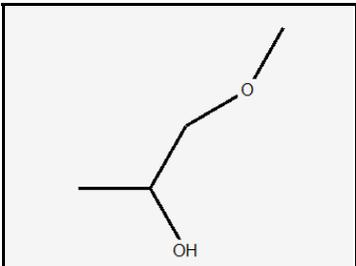
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
187	CAS番号 1115-20-4 3-ヒドロキシ-2,2-ジメチルプロピル=3-ヒドロキシ-2,2-ジメチルプロピオナート 備考: 	魚類	使用可 > 1039.9 mg/L	使用可 esters 156 mg/L	使用可 OEsters 96.0 mg/L Baseline Toxicity 1160 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 154 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 559.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1040 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 220 mg/L Baseline Toxicity 604 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 201 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
188	CAS番号 527-07-1 ナトリウム=D-グルコナート 備考: NaをHに置換し予測 	魚類	使用可 > 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 148000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 4780000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 143 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 1000mg/L	使用不可 Reactive unspecified 515000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1900000 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 1980 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)

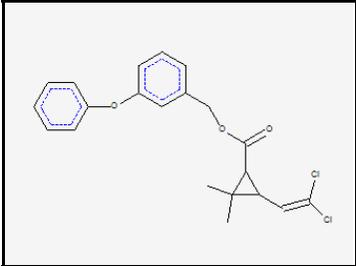
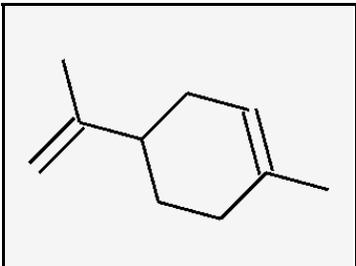
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
190	CAS番号 112-27-6 トリエチレングリコール 備考: 	魚類	使用可 69800 mg/L	使用可 basesurface narcotics 205000 mg/L	使用可 Neutral Organics 287000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 422000 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 194000 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 39459 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 508000 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 115000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 22800 mg/L ※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) Neutral Organics 10400 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
191	官報公示整理:2-415 CAS番号 111-46-6 ジエチレングリコール 備考: 	魚類	使用可 75200mg/L	使用可 basesurface narcotics 101000 mg/L	使用可 Neutral Organics 115000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 174000 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 80900 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 10000mg/L	使用不可 basesurface narcotics 218000 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 47300 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 10800 mg/L ※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) Neutral Organics 4880 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)

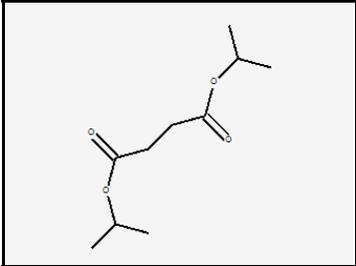
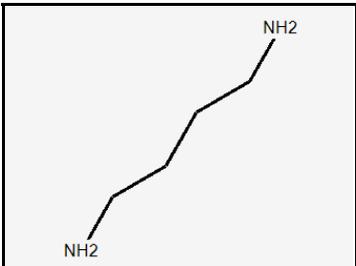
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
192	CAS番号 112-60-7 2, 2'-[オキシビス(エタン-2, 1-ジイルオキシ)] ジエタノール 備考: 	魚類	使用可 > 10000mg/L	使用可 basesurface narcotics 417000 mg/L	使用可 Neutral Organics 654000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 937000 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 426000 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 7746mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1140000 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 256000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 44100 mg/L ※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) Neutral Organics 20500 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 194.23 logP(KowWin) -2.023 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.51E+0 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 1.89E+0~2.53E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
193	CAS番号 107-41-5 2-メチル-2, 4-ペンタンジオール 備考: 	魚類	使用可 8690 mg/L	使用可 basesurface narcotics 3190 mg/L	使用可 Neutral Organics 1830 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 3430 mg/L Neutral Organics 1730 mg/L
		甲殻類	使用可 3200 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 3460 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 911 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 589 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 243 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 118.18 logP(KowWin) 0.58 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.33E-1 ※3 [予測値] 32560 ※1 LUMO(eV) 3.09E+0~3.29E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
194	旧指定または旧2監通し番号 CAS番号 <b>646-06-0</b> :1094 <b>1,3-ジオキソラン</b> 備考: 	魚類	使用可 > 95.4 mg/L	使用可 basesurface narcotics 8000 mg/L	使用可 Neutral Organics 7190 mg/L	使用可 Oethers aliphatic 7650 mg/L Neutral Organics 5980 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 12400 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3300 mg/L	使用不可 Neutral Organics 583 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
分子量 74.08 logP(KowWin) -0.307 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -2.29E-1 ※3 [予測値] 276900 ※1 LUMO(eV) 2.42E+0~2.42E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
195	CAS番号 <b>34590-94-8</b> <b>1(又は2)-[2-メトキシ(メチル)エトキシ]プロパノール</b> 備考: 1-(2-メトキシ-2-メチルエトキシ)-2-プロパノールを予測 	魚類	使用可 > 891 mg/L	使用可 basesurface narcotics 17300 mg/L	使用可 Neutral Organics 15600 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 26500 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 12900 mg/L
		甲殻類	使用可 1919 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 27000 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 7120 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 2870 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 1240 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
分子量 148.2 logP(KowWin) -0.346 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -2.58E-1 ※3 [予測値] 493600 ※1 LUMO(eV) 2.43E+0~3.02E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
196	CAS番号 <b>25498-49-1</b> 2-[2-[2-メトキシ(メチル)エトキシ](メチル)エトキシ](メチル)エタノール 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 15900 mg/L	使用可 Neutral Organics 16100 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 27900 mg/L ※f;判定留意(麻醉作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 13600 mg/L
		甲殻類	> 10000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 25200 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 7470 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 3240 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 1390 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 206.28 logP(KowWin) -0.203 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.51E-1 ※3 [予測値] 195800 ※1 LUMO(eV) 2.09E+0~2.68E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
197	CAS番号 <b>107-88-0</b> 1,3-ブタンジオール 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 13000 mg/L	使用可 Neutral Organics 8450 mg/L	使用可 ○alcohols aliphatic 14500 mg/L Neutral Organics 7050 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 17800 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3880 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 1610 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 692 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 90.12 logP(KowWin) -0.291 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -2.17E-1 ※3 [予測値] 220400 ※1 LUMO(eV) 3.19E+0~3.34E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
198	CAS番号 629-11-8  1,6-ヘキサジオール  備考:   分子量 118.18 logP(KowWin) 0.765 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 5.71E-1 ※3 [予測値] 22650 ※1 LUMO(eV) 3.25E+0~3.59E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 2420 mg/L	使用可 Neutral Organics 1250 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 2390 mg/L Neutral Organics 1210 mg/L
		甲殻類	> 500 mg/L	使用可 basesurface narcotics 2420 mg/L	使用可 Neutral Organics 633 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 449 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 184 mg/L
199	CAS番号 107-98-2  1-メトキシ-2-ヒドロキシプロパン  備考:   分子量 90.12 logP(KowWin) -0.489 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -3.65E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 2.76E+0~3.17E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 20800mg/L	使用可 basesurface narcotics 15800 mg/L	使用可 Neutral Organics 12700 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 21400 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 10300 mg/L
		甲殻類	23300mg/L	使用不可 basesurface narcotics 24400 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 5740 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 933 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 933 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
201	<b>旧3監:40</b> CAS番号 <b>52645-53-1</b>  ペルメトリン(別名 3-フェノキシベンジル=3-(2,2-ジクロロビニル)-2,2-ジメチルシクロプロパンカルボキシラート) 備考: 	魚類	使用可 0.00252 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.171 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 0.0350 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Vinyl/Allyl Halides 0.000882 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ○ Pyrethroids 0.000354 mg/L Baseline Toxicity 0.00400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	QSARモデルなし
		甲殻類	使用可 0.00032 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0712 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 0.0410 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Vinyl/Allyl Halides 0.00103 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ○ Pyrethroids 0.000220 mg/L Baseline Toxicity 0.00400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	QSARモデルなし
202	CAS番号 <b>138-86-3</b>  リモネン (dl-リモネン) 備考: 	魚類	使用可 1.1 mg/L	使用可 basesurface narcotics 0.585 mg/L	使用可 Neutral Organics 0.323 mg/L	使用可 ○hydrocarbons aliphatic 0.591 mg/L Neutral Organics 0.561 mg/L
		甲殻類	使用可 0.7 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.257 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.238 mg/L	使用可 ○hydrocarbons aliphatic 0.402 mg/L Neutral Organics 0.454 mg/L
	分子量 391.3 logP(KowWin) 7.427 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.28E+0 ※3 [予測値] 0.009747 ※1 LUMO(eV) -1.54E-1~1.61E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
	分子量 136.24 logP(KowWin) 4.827 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.59E+0 ※3 [予測値] 4.581 ※1 LUMO(eV) 1.16E+0~1.28E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
203	CAS番号 <b>924-88-9</b> Butanedioic acid, 1,4-bis(1-methylethyl) ester 備考:  分子量 202.25 logP(KowWin) 2.222 ※2 対水溶解(mg/L) 539.2 ※1 logBCFmaxtox 1.66E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 6.58E-1~1.15E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用可 esters 30.1 mg/L	使用可 OEsters 20.1 mg/L Baseline Toxicity 105 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 esters aliphatic 25.5 mg/L
		甲殻類	> 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 90.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 40.7 mg/L Baseline Toxicity 60.8 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aliphatic 31.7 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
204	CAS番号 <b>110-60-1</b> テトラメチレンジアミン 備考: アミン類  分子量 88.15 logP(KowWin) -0.636 ※2 対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logBCFmaxtox -4.75E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 730mg/L	使用可 narcotic amines 1220 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 914 mg/L Baseline Toxicity 16900 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 930 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 38000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 80.1 mg/L Baseline Toxicity 7510 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 138 mg/L

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

予測値の選択

QSARクラス複数該当の場合は、下記の順番で条件に合う予測結果

(○印付記)を用いることが望ましい。

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

また、予測結果の信頼性が低い以下のクラスは使用不可とした

- ・TIMES : Reactive Unspecified
- ・KATE : Unclassified
- ・ECOSAR: Baseline toxicity, Baseline toxicity(acid)

(※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)

※1 Wskowwin v1.42により算出

※2 KowWin v1.68により算出

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

LUMO : the energy of the lowest unoccupied molecular orbital

BCFmaxtox : the maximum bioconcentration factor

ODDI: the donor delocalizability of the aldehyde O-atom

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

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

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

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

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

※D: Out of Domain (TIMES) <使用不可>

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

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

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