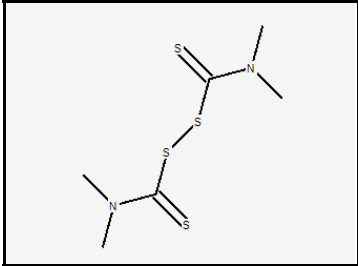
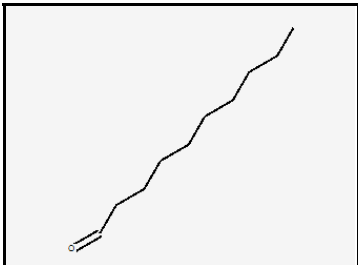
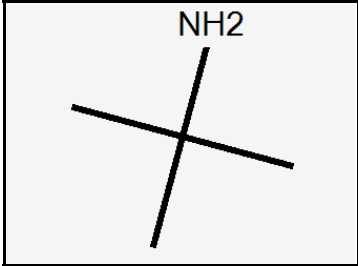
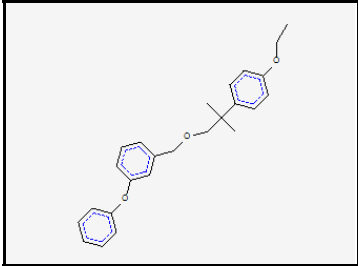


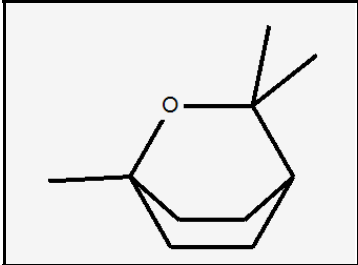
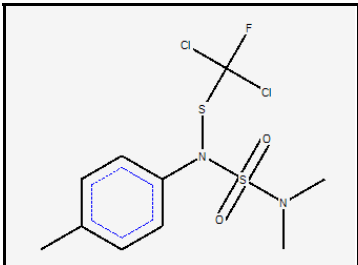
QSAR予測結果 一般化学物質 1. 今回新たに有害性クラスの付与を行う物質(候補)

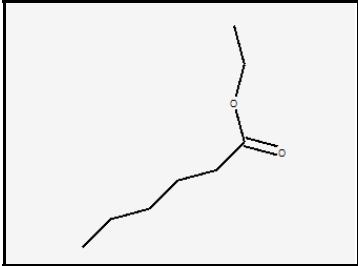
資料4-2参考

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
30	CAS番号 137-42-8 モノメチルジチオカルバミン酸ナトリウム 備考: NaをHに置換 分子量 107.19 logP(KowWin) 0.48 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.58E-1 ※3 [予測値] 440400 ※1 LUMO(eV) -4.89E-1~-4.78E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.091 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 777 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Thiocarbamate,Di(free acid) 2.93 mg/L ----- Baseline Toxicity 2040 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 barbitals or thiols other 6800 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 0.279 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1520 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Thiocarbamate,Di(free acid) 0.476 mg/L ----- Baseline Toxicity 1010 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
4	旧指定または旧2監61 CAS番号 64359-81-5 4, 5-ジクロロ-2-n-オクチルイソチアゾル -3-オン 備考: 分子量 282.23 logP(KowWin) 3.59 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.68E+0 ※3 [予測値] 13.37 ※1 LUMO(eV) -7.7E-1~-7.08E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.0027 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5.35 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Thiazolones (Iso-) 0.0510 mg/L ----- Vinyl/Allyl Halides 1.96 mg/L ----- Baseline Toxicity 8.65 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 halides1 1.60 mg/L ※F,判定不能 (部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.00522 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4.52 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Thiazolones (Iso-) 0.0790 mg/L ----- Vinyl/Allyl Halides 1.77 mg/L ----- Baseline Toxicity 5.69 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 halides1 2.50 mg/L ※F,判定不能 (部分構造適用範囲外)

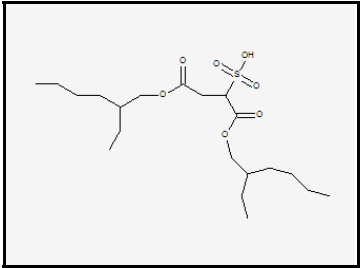
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
5	旧指定または旧2監390, CAS番号 137-26-8 旧3監177 チウラム 備考: 	魚類	使用可 0.042 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 110 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Thiocarbamate, Di(Substit) 0.234 mg/L ----- Baseline Toxicity 365 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 disulfides(ClogP) 7.60 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 0.036 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 181 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Thiocarbamate, Di(Substit) 0.800 mg/L ----- Baseline Toxicity 202 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 disulfides 14.0 mg/L ※P, ※F,判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 240.42 logP(KowWin) 1.703 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.27E+0 ※3 [予測値] 9064 ※1 LUMO(eV) -1.61E+0~-1.11E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
7	CAS番号 112-31-2 1-デカナール 備考: 	魚類	使用可 1.45 mg/L	使用可 aldehydes 1.46 mg/L -----	使用可 ○Aldehydes (Mono) 1.07 mg/L ----- Baseline Toxicity 3.35 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 aldehydes 1.30 mg/L -----
		甲殻類	使用可 1.17 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2.65 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 0.715 mg/L ----- Baseline Toxicity 2.24 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 aldehydes 0.990 mg/L ※P;判定不能 (logP適用範囲外)
	分子量 156.27 logP(KowWin) 3.763 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.81E+0 ※3 [予測値] 60.79 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.9E-1~2.89E-1 ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
15	CAS番号 75-64-9 tert-ブチルアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 28 mg/L	使用不可 narcotic amines 128 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Aliphatic Amines 96.9 mg/L Baseline Toxicity 841 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 primary amines aliphatic 120 mg/L
		甲殻類	使用可 136 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1760 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines 9.96 mg/L Baseline Toxicity 425 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 primary amines aliphatic 14.0 mg/L
18	旧3監223 CAS番号 80844-07-1 2-(4-エトキシフェニル)-2-メチルプロピル =3-フェノキシベンジルエーテル(別名エトフェ ンブックス) 備考: 	魚類	使用可 0.0027 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.185 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.00400 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上)	使用不可 ethers with aromatic 0.00350 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.00950 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.00057 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.0762 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.00400 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上)	使用不可 ethers with aromatic 0.0410 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外) Neutral Organics 0.0230 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			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
28	CAS番号 470-82-6 1, 3, 3-トリメチル-2-オキサビシクロ[2, 2, 2]オクタン 備考: 	魚類	使用可 57 mg/L	使用可 basesurface narcotics 31.6 mg/L	使用可 Neutral Organics 12.2 mg/L	使用可 Oethers aliphatic 46.0 mg/L Neutral Organics 17.0 mg/L
		甲殻類	使用可 200 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 17.1 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 7.67 mg/L	使用可 Neutral Organics 6.70 mg/L
29	旧指定または旧2監892, CAS番号 731-27-1 旧3監56 N-[[ジクロロ(フルオロ)メチル]スルファニル]-N', N'-ジメチル-N-p-トリルスルファミド 備考: 	魚類	使用可 0.0175 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.32 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 20.8 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 amines aromatic or phenols5 13.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.19 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.52 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 13.3 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 amines aromatic or phenols5 4.70 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
	分子量 154.25 logP(KowWin) 3.133 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.34E+0 ※3 [予測値] 332.1 ※1 LUMO(eV) 2.85E+0~2.85E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
	分子量 347.25 logP(KowWin) 3.265 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.44E+0 ※3 [予測値] 3.006 ※1 LUMO(eV) -1.39E+0~-1.29E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
31	CAS番号 123-66-0 Ethyl hexanoate 備考: 	魚類	使用可 8.94 mg/L	使用可 esters 10.8 mg/L	使用可 OEsters 6.33 mg/L Baseline Toxicity 21.4 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 7.10 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 19.8 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OEsters 12.0 mg/L Baseline Toxicity 13.1 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 8.60 mg/L
	分子量 144.22 対水溶解(mg/L) 308.7 ※1 [予測値]	logP(KowWin) 2.829 ※2 logBCFmaxtox 2.11E+0 ※3 LUMO(eV) 1.16E+0~1.23E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6				

QSAR予測結果 一般化学物質 2. 平成22~27年度に有害性クラスの付与を行った物質

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
3	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 	魚類	使用可 68 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0817 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Esters-acid 2.29 mg/L ※P; (logP>5, 溶解限度以上) Baseline Toxicity 0.0730 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 0.690 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 0.0400 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Esters-acid 3.07 mg/L ※P; (logP>5, 溶解限度以上) Baseline Toxicity 0.0600 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 24.0 mg/L ※P, ※F, 判定不能 (logP及び部分構造 適用範囲外)
	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) -1.46E+0~-9.12E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					