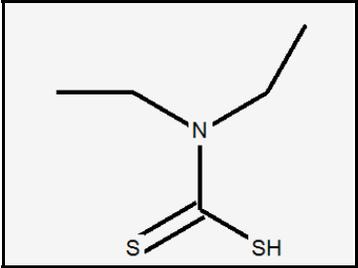
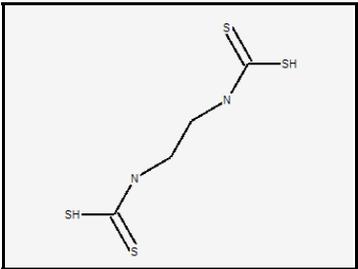
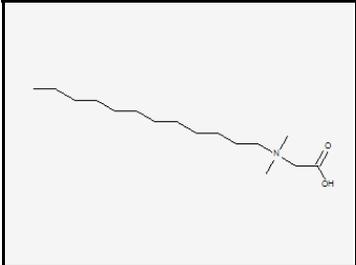
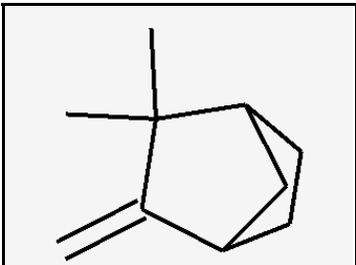
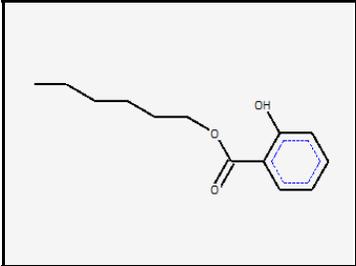
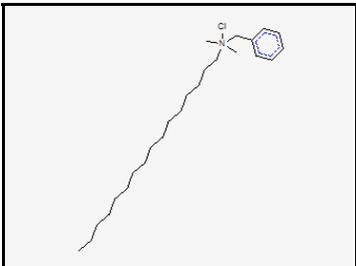
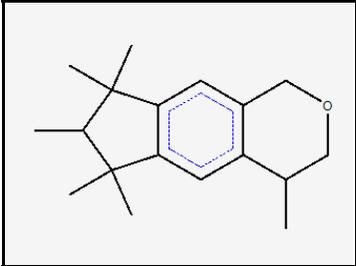
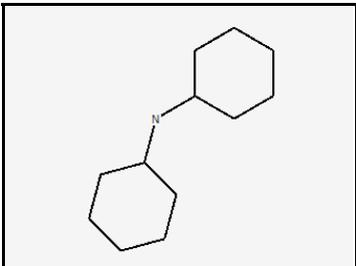
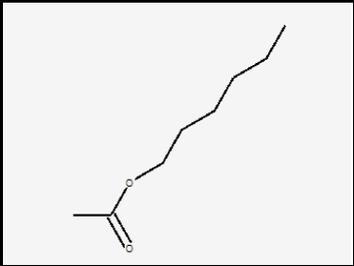
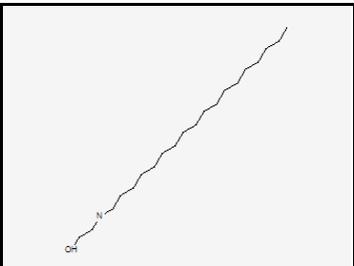


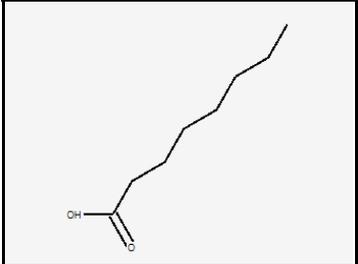
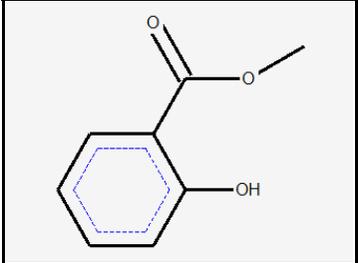
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
2	CAS番号 3699-30-7 カリウム=ジエチルジチオカルバマート 備考: 審査対象物質はK塩だが酸に代替し予測 	魚類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			6.9 mg/L	Reactive unspecified 97.6 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	○Thiocarbamate,Di(free acid) 2.09 mg/L Neutral Organic 241 mg/L	barbitals or thiols other 122 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可	使用不可	使用可	QSARモデルなし
			0.91 mg/L	Reactive unspecified 145 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	○Thiocarbamate,Di(free acid) 0.488 mg/L Neutral Organic 133 mg/L	
	分子量 149.27 logP(KowWin) 1.673 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.25E+0 ※3 [予測値] 28990 ※1 LUMO(eV) -8.92E-1~-3.8E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
3	CAS番号 12427-38-2 N, N' -エチレンビス(ジチオカルバミン酸)マンガン (別名マンネブ) 備考: 旧3監通し番号:179 審査対象物質はMn塩だが酸に代替し予測 	魚類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			0.27 mg/L	Reactive unspecified 917 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	○Thiocarbamate,Di(free acid) 5.38 mg/L Neutral Organic 3040 mg/L	barbitals or thiols other 8080 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可	使用不可	使用可	QSARモデルなし
			0.12 mg/L	Reactive unspecified 1900 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	○Thiocarbamate,Di(free acid) 0.911 mg/L Neutral Organic 1520 mg/L	
	分子量 212.36 logP(KowWin) 0.619 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.61E-1 ※3 [予測値] 28140 ※1 LUMO(eV) -1.1E+0~-7.68E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

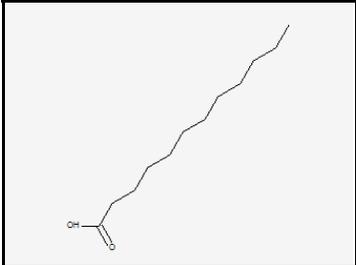
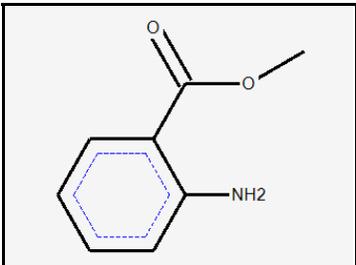
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
4	CAS番号 683-10-3 2-(N-ドデシル-N,N-ジメチルアンモニオ)アセ タート 備考: 旧指定または旧2監通し番 号:1055 	魚類	使用可 0.876 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.07 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics-acid 52500 mg/L	使用不可 acids 5530 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 1.99 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 18.6 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics-acid 25900 mg/L	使用不可 acids 278 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
5	CAS番号 79-92-5 カンフェン 備考: 	魚類	使用可 0.72 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1.58 mg/L	使用可 Neutral Organics 0.873 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 1.36 mg/L Neutral Organics 1.41 mg/L
		甲殻類	使用可 0.72 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.764 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.615 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 0.698 mg/L Neutral Organics 0.938 mg/L

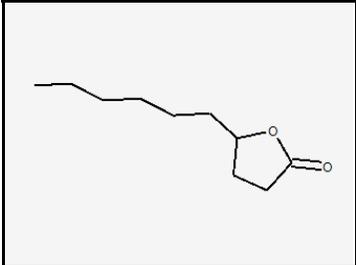
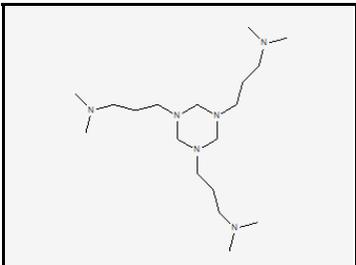
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
6	CAS番号 6259-76-3 ヘキサン-1-イル=2-ヒドロキシベンゾアート 備考: 	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 phenols and anilines 0.216 mg/L	使用可 Esters 0.486 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) ○ Phenols 0.183 mg/L Neutral Organic 0.327 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	使用可 amines aromatic or phenols4 0.269 mg/L
		甲殻類	0.357 mg/L	使用不可 phenols and anilines 0.617 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Esters 0.728 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) ○ Phenols 0.215 mg/L Neutral Organic 0.246 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 amines aromatic or phenols4 0.390 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
	分子量 222.29 logP(KowWin) 5.059 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.76E+0 ※3 [予測値] 6.084 ※1 LUMO(eV) -5.57E-1 ~ -3.62E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
7	CAS番号 68424-85-1 ベンジル[アルキル(C12~16)]ジメチルアンモニウムクロリド 備考: C=16として予測 	魚類	使用可 0.515 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 0.821 mg/L	使用不可 hydrocarbons aromatic 2.64 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	0.0059 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 0.609 mg/L	使用不可 hydrocarbons aromatic 1.07 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
	分子量 396.11 logP(KowWin) 4.893 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox ※3 [予測値] 0.2147 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

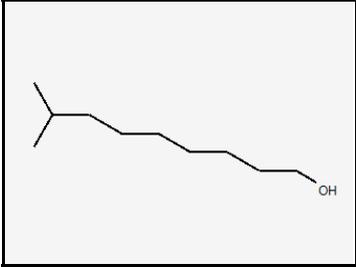
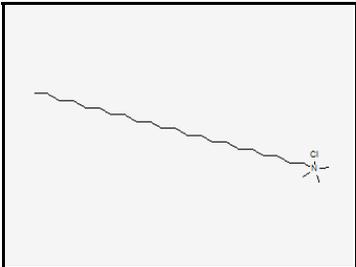
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
8	CAS番号 1222-05-5 4, 6, 6, 7, 8, 8-ヘキサメチル-1, 3, 4, 6, 7, 8-ヘキサヒドロシクロペンタ[g]イソクロメン 備考: 	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 basesurface narcotics 0.0920 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.0320 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 ethers with aromatic 0.0273 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.0680 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 basesurface narcotics 0.0331 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.0270 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 ethers with aromatic 0.112 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 0.0993 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
	分子量 258.41 logP(KowWin) 6.26 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.45E+0 ※3 [予測値] 0.1943 ※1 LUMO(eV) 3.6E-1~4.1E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
9	CAS番号 101-83-7 N, N-ジシクロヘキシルアミン 備考: アミン類 旧指定または旧2監通し番号:1084 旧3監通し番号:275 	魚類	使用可 12 mg/L	使用可 narcotic amines 1.26 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 0.971 mg/L Neutral Organic 1.12 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 0.806 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.49 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 0.152 mg/L Neutral Organic 0.788 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 30.0 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
	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					

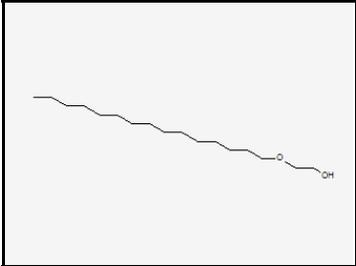
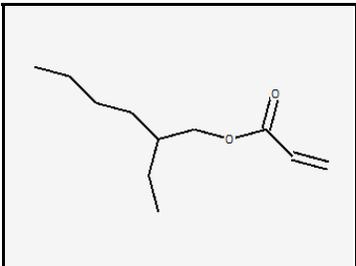
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
10	CAS番号 142-92-7 酢酸ヘキシル 備考: 	魚類	使用可 4 mg/L	使用可 esters 10.6 mg/L	使用可 OEsters 6.33 mg/L Neutral Organic 21.4 mg/L	使用可 esters aliphatic 7.09 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 19.6 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 12.0 mg/L Neutral Organic 13.1 mg/L	使用可 esters aliphatic 8.63 mg/L
			分子量 144.22	logP(KowWin) 2.829 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 308.7 ※1	logBCFmaxtox 2.11E+0 ※3 LUMO(eV) 1.11E+0~1.17E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
11	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 	魚類	使用可 1 mg/L	使用可 narcotic amines 0.216 mg/L	使用不可 Aliphatic Amines 0.0230 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.00500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 secondary or tertiary amines 0.0152 mg/L ※P;使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Aliphatic Amines 0.00500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.00500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 secondary or tertiary amines 21.8 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
			分子量 313.57	logP(KowWin) 7.202 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 0.07357 ※1	logBCFmaxtox 4.39E+0 ※3 LUMO(eV) ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

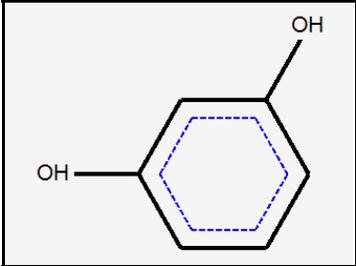
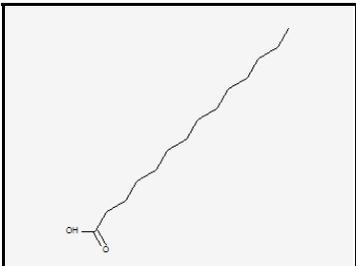
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
14	CAS番号 124-07-2 オクタン酸 備考: 	魚類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 16.7 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 140 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 40.1 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 12.4 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 87.3 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 39.7 mg/L
分子量 144.22 logP(KowWin) 3.033 ※2 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						
15	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	> 100 mg/L	使用可 phenols and anilines 8.74 mg/L	使用可 O Esters 9.03 mg/L Phenols 9.19 mg/L Neutral Organic 35.9 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 10.8 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 phenols and anilines 6.91 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Esters 17.6 mg/L O Phenols 3.62 mg/L Neutral Organic 21.5 mg/L	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						

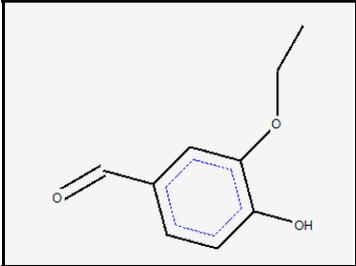
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
16	16 CAS番号 10124-65-9 Potassium laurate 備考: 審査対象物質はK塩だが酸に代替し予測 	魚類	使用可 35 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.596 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics-acid 3.34 mg/L	使用不可 acids 2.07 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 0.256 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics-acid 2.50 mg/L	使用不可 acids 20.2 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
分子重 200.32 logP(KowWin) 4.998 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.71E+0 ※3 [予測値] 12.76 ※1 LUMO(eV) 1.02E+0~1.06E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
17	17 CAS番号 134-20-3 Methyl 2-aminobenzoate 備考: アミン類 	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 Neutral Organic 71.8 mg/L	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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Esters 28.6 mg/L ○ Anilines (Hindered) 11.7 mg/L Neutral Organic 41.8 mg/L	使用不可 amines aromatic or phenols5 5.16 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
分子重 151.17 logP(KowWin) 2.265 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.69E+0 ※3 [予測値] 1860 ※1 LUMO(eV) -2.03E-1~-1.19E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

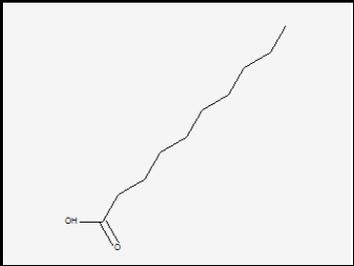
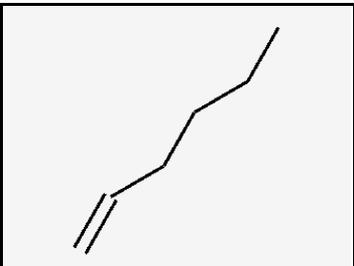
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
18	CAS番号 706-14-9 5-ヘキシル-4,5-デヒドロ-2(3H)フラン 備考: 	魚類	使用可 18 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 49.2 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 10.6 mg/L Neutral Organic 43.3 mg/L	使用可 esters aliphatic 12.6 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 41.0 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 20.8 mg/L Neutral Organic 25.9 mg/L	使用可 esters aliphatic 15.4 mg/L
			分子量 170.25	logP(KowWin) 2.567 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 291.6 ※1	logBCFmaxtox 1.92E+0 ※3 LUMO(eV) 1.15E+0~1.19E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
19	CAS番号 15875-13-5 1,3,5-トリス(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 37000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aliphatic Amines 15000 mg/L O Triazines, Aliphatic 569 mg/L Neutral Organic 469000 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 20100 mg/L ※P;使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aliphatic Amines 1180 mg/L O Triazines, Aliphatic 25.1 mg/L Neutral Organic 191000 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 352 mg/L ※P, ※F;使用不能(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) [予測値] 1000000 ※1	logBCFmaxtox -1.18E+0 ※3 LUMO(eV) 2.19E+0~2.81E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

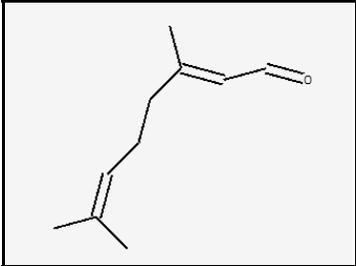
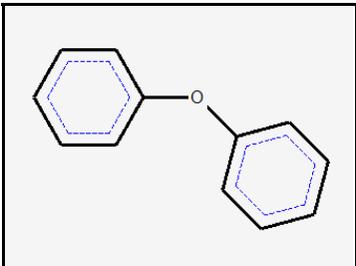
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
20	CAS番号 25339-17-7 イソデカノール 備考:  分子量 158.29 logP(KowWin) 3.714 ※2 対水溶解(mg/L) 151.8 ※1 logBCFmaxtox 2.77E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 3.39E+0~3.58E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 5.9 mg/L	使用可 basesurface narcotics 13.7 mg/L	使用可 Neutral Organics 3.76 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 9.76 mg/L Neutral Organics 5.55 mg/L
		甲殻類	使用可 3.5 mg/L	使用可 basesurface narcotics 5.79 mg/L	使用可 Neutral Organics 2.50 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 7.95 mg/L ※f:使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 2.84 mg/L
21	CAS番号 68607-24-9 Quaternary ammonium compounds, C20-22-alkyltrimethyl, chlorides 備考: C=22として予測  分子量 404.17 logP(KowWin) 6.131 ※2 対水溶解(mg/L) 0.01675 ※1 logBCFmaxtox ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	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:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 hydrocabons aliphatic 0.182 mg/L ※P, ※F:使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 0.135 mg/L ※P, ※F:使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 1.39 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Neutral Organics 0.0540 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 hydrocabons aliphatic 0.267 mg/L ※P, ※F:使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 0.187 mg/L ※P, ※F:使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)

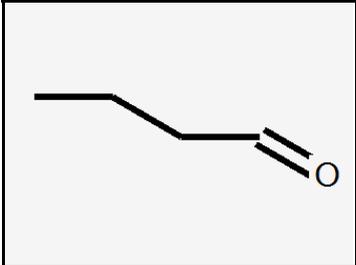
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
22	CAS番号 68951-67-7 Alcohols, C14-15, ethoxylated 備考: C=15、n=1として予測 	魚類	使用可 0.65 mg/L	使用可 basesurface narcotics 0.340 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.0610 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.200 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.125 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.201 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.0895 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.0500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.501 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 0.161 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			分子量 272.48	logP(KowWin) 5.969 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 0.4575 ※1	logBCFmaxtox 4.33E+0 ※3		
				LUMO(eV) 2.63E+0~2.89E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
23	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAcrylates 0.769 mg/L Neutral Organic 2.00 mg/L	使用不可 acrylates 0.625 mg/L ※P;使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAcrylates 0.811 mg/L Neutral Organic 1.38 mg/L	使用不可 acrylates 2.67 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			分子量 184.28	logP(KowWin) 4.092 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 16.8 ※1	logBCFmaxtox 3.05E+0 ※3		
				LUMO(eV) -5.21E-2~3.48E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

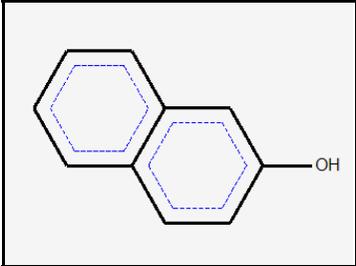
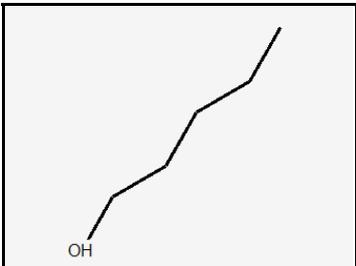
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
24	CAS番号 108-46-3 レゾルシン 備考: 	魚類	使用可 26.8 mg/L	使用可 phenols and anilines 136 mg/L	使用可 OPhenols, Poly 22.2 mg/L Neutral Organic 669 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 105 mg/L
		甲殻類	使用可 1 mg/L	使用可 phenols and anilines 41.0 mg/L	使用可 OPhenols, Poly 256 mg/L Neutral Organic 347 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols1 0.560 mg/L
26	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 0.0110 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 acids 0.0210 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 0.178 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 0.0110 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 acids 6.36 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)

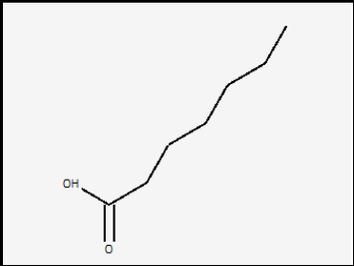
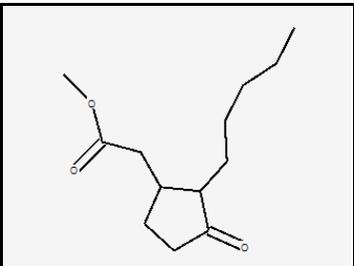
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
29	CAS番号 121-32-4 3-エトキシ-4-ヒドロキシベンズアルデヒド 備考: 	魚類	使用可 87.6 mg/L	使用可 aldehydes 19.1 mg/L	使用可 OAldehydes (Mono) 16.4 mg/L Phenols 63.9 mg/L Neutral Organic 349 mg/L	使用可 aldehydes 16.3 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 235 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aldehydes (Mono) 33.2 mg/L O Phenols 15.7 mg/L Neutral Organic 190 mg/L	使用不可 aldehydes 16.4 mg/L ※F:使用不能(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) [予測値] 2867 ※1	logBCFmaxtox 1.15E+0 ※3		
				LUMO(eV) ※4		
				ODDI 2.88E-1~2.96E-1 ※5		
				Qc ※6		
30	CAS番号 142-82-5 n-ヘプタン 備考: 	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 basesurface narcotics 8.62 mg/L	使用可 Neutral Organics 2.08 mg/L	使用可 Ohydrocabons 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 Ohydrocabons aliphatic 0.987 mg/L Neutral Organics 1.63 mg/L
			分子量 100.21	logP(KowWin) 3.779 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 3.554 ※1	logBCFmaxtox 2.82E+0 ※3		
				LUMO(eV) 3.67E+0~3.79E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

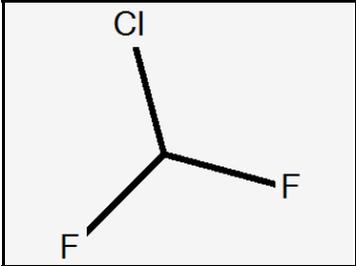
#	化学物質	対象	毒性値															
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9												
31	CAS番号 334-48-5 デカン酸 備考: 	魚類	使用可 > 16 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3.13 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics-acid 21.9 mg/L	使用可 acids 9.22 mg/L												
		甲殻類	使用可 > 20 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.77 mg/L 使用不能(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												
			分子量	172.27	logP(KowWin)	4.016 ※2	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
32	CAS番号 592-41-6 1-ヘキセン 備考: 	魚類	使用可 5.6 mg/L	使用可 basesurface narcotics 8.91 mg/L	使用可 Neutral Organics 6.39 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 6.69 mg/L Neutral Organics 8.71 mg/L												
		甲殻類	使用可 est. 30 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 6.09 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4.04 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 1.70 mg/L Neutral Organics 3.53 mg/L												
			分子量	84.16	logP(KowWin)	3.152 ※2	対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	2.35E+0 ※3	[予測値]	47.46 ※1	LUMO(eV)	1.37E+0~1.4E+0 ※4	ODDI	※5	Qc	※6

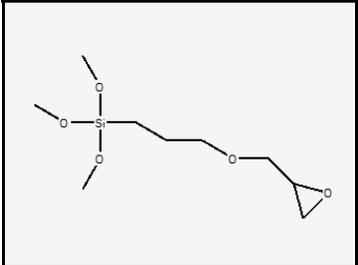
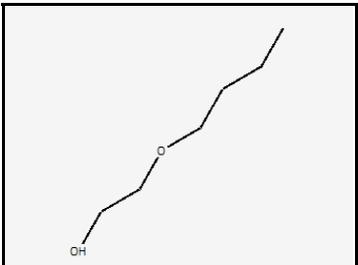
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
33	シトラール CAS番号 5392-40-5 備考: 	魚類	使用可 4.1 mg/L	使用可 aldehydes 1.67 mg/L	使用可 OVinyl/Allyl Aldehydes 0.162 mg/L Neutral Organic 6.30 mg/L	使用可 conjugated systems1 0.162 mg/L
		甲殻類	使用可 6.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3.93 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OVinyl/Allyl Aldehydes 5.79 mg/L Neutral Organic 4.09 mg/L	使用不可 conjugated systems1 0.0264 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
	分子量 152.24 対水溶解(mg/L) [予測値] 84.71 ※1 logP(KowWin) 3.445 ※2 logBCFmaxtox 2.57E+0 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.92E-1~3.01E-1 ※5 Qc ※6					
34	フェノキシベンゼン CAS番号 101-84-8 備考: 旧3監通し番号:98 	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 Oethers 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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1.39 mg/L	使用可 Oethers with aromatic 0.899 mg/L Neutral Organics 1.84 mg/L
	分子量 170.21 対水溶解(mg/L) [予測値] 15.58 ※1 logP(KowWin) 4.049 ※2 logBCFmaxtox 3.02E+0 ※3 LUMO(eV) 1.37E-1~2.11E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

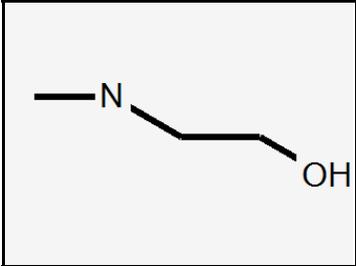
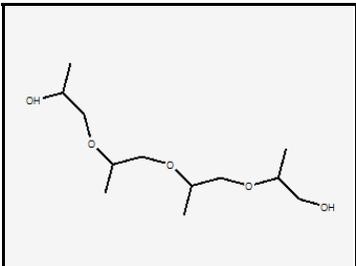
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
36	CAS番号 123-72-8 n-ブチルアルデヒド 備考: 	魚類	使用可 13.4 mg/L	使用可 aldehydes 22.1 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 17.2 mg/L Neutral Organic 685 mg/L	使用可 aldehydes 16.0 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 707 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 50.0 mg/L Neutral Organic 349 mg/L	使用可 aldehydes 17.5 mg/L
			分子量 72.11	logP(KowWin) 0.816 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 23850 ※1	logBCFmaxtox 6.09E-1 ※3		
				LUMO(eV) ※4		
				ODDI 2.89E-1~2.91E-1 ※5		
				Qc ※6		
37	CAS番号 107-15-3 エチレンジアミン 備考: 旧指定または旧2監通し番号:1018 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 Neutral Organic 87700 mg/L	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 215 mg/L Neutral Organic 35700 mg/L	使用不可 primary amines aliphatic 437 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			分子量 60.1	logP(KowWin) -1.618 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1	logBCFmaxtox -1.21E+0 ※3		
				LUMO(eV) ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

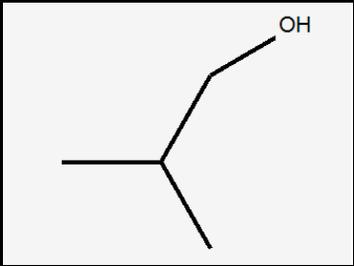
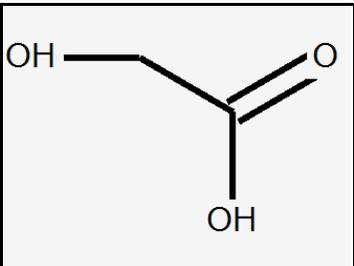
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
38	CAS番号 135-19-3 2-ナフトール	魚類	使用可 4 mg/L	使用可 phenols and anilines 7.79 mg/L	使用可 OPhenols 7.50 mg/L Neutral Organic 28.5 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 8.87 mg/L
			備考: 	使用可 5.3 mg/L	使用不可 phenols and anilines 6.28 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 OPhenols 3.07 mg/L Neutral Organic 17.2 mg/L
	分子量 144.17 対水溶解(mg/L) [予測値] 1512 ※1 logP(KowWin) 2.689 ※2 logBCFmaxtox 2.01E+0 ※3 LUMO(eV) -3.44E-1 ~ -3.44E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類				
39	CAS番号 71-41-0 1-ペンタノール	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
			備考: 	使用可 341.21 mg/L	使用可 basesurface narcotics 565 mg/L	使用可 Neutral Organics 154 mg/L
	分子量 88.15 対水溶解(mg/L) [予測値] 20890 ※1 logP(KowWin) 1.332 ※2 logBCFmaxtox 9.94E-1 ※3 LUMO(eV) 3.49E+0 ~ 3.6E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類				

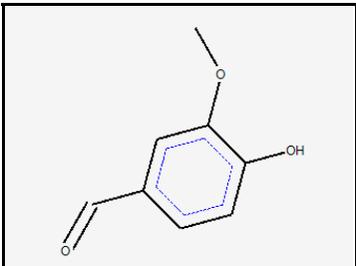
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
40	CAS番号 111-14-8 n-ヘプタン酸	魚類	使用可 74.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 37.3 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 348 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 82.4 mg/L
			甲殻類	使用可 72 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 32.0 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 208 mg/L ※N:構造適用範囲外
備考:						
分子量 130.19 logP(KowWin) 2.542 ※2 対水溶解(mg/L) 1955 ※1 logBCFmaxtox 1.9E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.02E+0~1.07E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
41	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	魚類	使用可 19 mg/L	使用可 esters 11.0 mg/L	使用可 OEsters 8.16 mg/L Neutral Organic 24.8 mg/L	使用可 esters aliphatic 8.88 mg/L ※f:使用留意(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 15.3 mg/L Neutral Organic 15.4 mg/L
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						

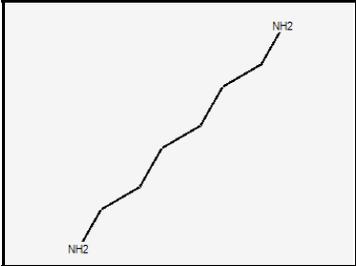
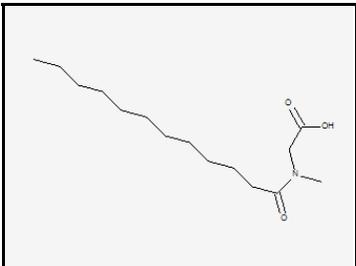
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
42	CAS番号 75-45-6 クロロ(ジフルオロ)メタン	魚類	使用可 777 mg/L	使用可 basesurface narcotics 334 mg/L	使用可 Neutral Organics 699 mg/L	使用不可 halides3 342 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 basesurface narcotics 550 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 358 mg/L
備考: 						
分子量 86.47 logP(KowWin) 0.894 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 6.67E-1 ※3 [予測値] 2748 ※1 LUMO(eV) -1.39E-1~-1.39E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
43	CAS番号 577-11-7 スルホコハク酸ジ-2-エチルヘキシルNa塩	魚類	使用可 68 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0830 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters-acid 2.29 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.0730 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 acids 0.693 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			甲殻類	使用可 19 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0404 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters-acid 3.07 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.0600 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
備考: 審査対象物質はNa塩だが酸に代替し予測						
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						

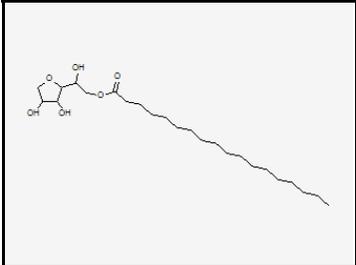
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
44	CAS番号 2530-83-8 2-[[3-(トリメトキシシリル)プロポキシ]メチル]オキシシラン	魚類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 43300 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Epoxides, mono 923 mg/L ○ Alkoxy Silanes 101 mg/L Neutral Organic 80600 mg/L	使用不可 epoxides(ClogP) 31.7 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			55 mg/L			
44	備考: 	甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 100000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Epoxides, mono 5970 mg/L ○ Alkoxy Silanes 31.0 mg/L Neutral Organic 35000 mg/L	使用不可 epoxides(ClogP) 95.9 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			473 mg/L			
	分子量 236.34 対水溶解(mg/L) [予測値] 170000 ※1	logP(KowWin) -0.915 ※2 logBCFmaxtox -6.83E-1 ※3 LUMO(eV) 9.68E-1~1.38E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6				
45	CAS番号 9003-13-8 Poly[oxy(methyl-1,2-ethanediyl)], .alpha.-butyl-.omega.-hydroxy-	魚類	使用可	使用可 basesurface narcotics 2710 mg/L	使用可 Neutral Organics 1880 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 3520 mg/L Neutral Organics 1770 mg/L
			50 mg/L			
45	備考: n=1として予測 	甲殻類	使用可	使用不可 basesurface narcotics 3160 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 936 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 600 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 248 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			95 mg/L			
	分子量 118.18 対水溶解(mg/L) [予測値] 64470 ※1	logP(KowWin) 0.567 ※2 logBCFmaxtox 4.23E-1 ※3 LUMO(eV) 2.64E+0~3.E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6				

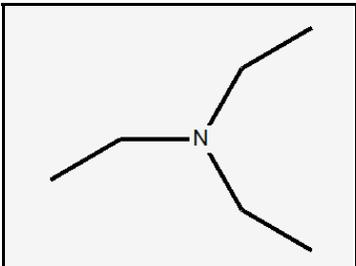
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
50	CAS番号 109-83-1 2-(メチルアミノ)エタノール	魚類	使用可 100 mg/L	使用可 narcotic amines 2260 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 1680 mg/L Neutral Organic 41300 mg/L	使用可 secondary or tertiary amines 2180 mg/L
			甲殻類	使用可 33 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 89500 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 139 mg/L Neutral Organic 17500 mg/L
	備考: アミン類					
						
	分子量 75.11 logP(KowWin) -1.146 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -8.55E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
52	CAS番号 25322-69-4 Poly[oxy(methyl-1,2-ethanediyl)], .alpha.-hydro-.omega.-hydroxy-	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 Oalcohols 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:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 12200 mg/L
	備考: n=4として予測					
						
	分子量 250.34 logP(KowWin) -0.352 ※2 対水溶解(mg/L) 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					

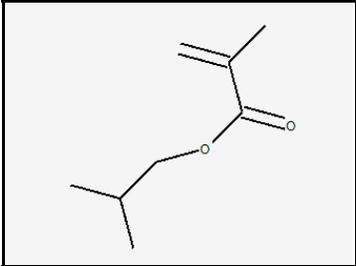
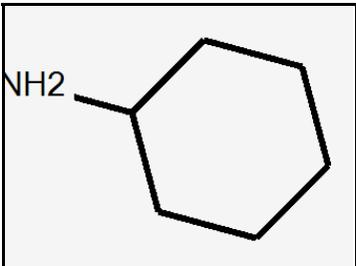
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
53	CAS番号 78-83-1 イソブタノール	魚類	使用可 1330 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1680 mg/L	使用可 Neutral Organics 779 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 1490 mg/L Neutral Organics 756 mg/L
			甲殻類	使用可 1100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1620 mg/L	使用可 Neutral Organics 395 mg/L
	備考: 					
	分子量 74.12 対水溶解(mg/L) [予測値] 97120 ※1		logP(KowWin) 0.767 ※2 logBCFmaxtox 5.73E-1 ※3 LUMO(eV) 3.5E+0~3.57E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6			
54	CAS番号 79-14-1 ヒドロキシ酢酸	魚類	使用可 > 56 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 16400 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 355000 mg/L ※N:構造適用範囲外	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 152000 mg/L ※N:構造適用範囲外
	備考: 					
	分子量 76.05 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1		logP(KowWin) -1.067 ※2 logBCFmaxtox -7.96E-1 ※3 LUMO(eV) 6.78E-1~7.22E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6			

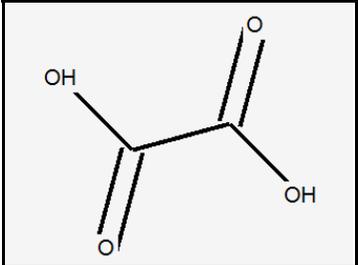
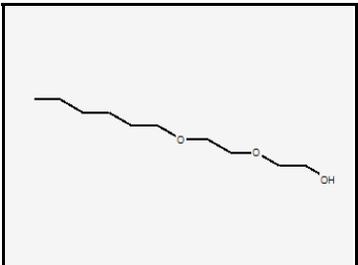
#	化学物質	対象	毒性値																						
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9																			
55	CAS番号 111-27-3 1-ヘキサノール	魚類	使用可 97.2 mg/L	使用可 basesurface narcotics 315 mg/L	使用可 Neutral Organics 121 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 258 mg/L Neutral Organics 137 mg/L																			
			甲殻類	使用可 201 mg/L	使用可 basesurface narcotics 226 mg/L	使用可 Neutral Organics 67.6 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 82.2 mg/L Neutral Organics 32.0 mg/L																		
備考: 		<table border="1"> <tr> <td>分子量</td> <td>102.18</td> <td>logP(KowWin)</td> <td>1.823 ※2</td> </tr> <tr> <td>対水溶解(mg/L)</td> <td></td> <td>logBCFmaxtox</td> <td>1.36E+0 ※3</td> </tr> <tr> <td>[予測値]</td> <td>6885 ※1</td> <td>LUMO(eV)</td> <td>3.47E+0~3.6E+0 ※4</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td>ODDI</td> <td>※5</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td>Qc</td> <td>※6</td> </tr> </table>				分子量	102.18	logP(KowWin)	1.823 ※2	対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	1.36E+0 ※3	[予測値]	6885 ※1	LUMO(eV)	3.47E+0~3.6E+0 ※4			ODDI	※5			Qc	※6
分子量	102.18	logP(KowWin)	1.823 ※2																						
対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	1.36E+0 ※3																						
[予測値]	6885 ※1	LUMO(eV)	3.47E+0~3.6E+0 ※4																						
		ODDI	※5																						
		Qc	※6																						
56	CAS番号 121-33-5 バニリン	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 Neutral Organic 882 mg/L	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Aldehydes (Mono) 70.3 mg/L Phenols 27.3 mg/L Neutral Organic 459 mg/L	使用不可 aldehydes 27.5 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)																		
備考: 		<table border="1"> <tr> <td>分子量</td> <td>152.15</td> <td>logP(KowWin)</td> <td>1.055 ※2</td> </tr> <tr> <td>対水溶解(mg/L)</td> <td></td> <td>logBCFmaxtox</td> <td>7.87E-1 ※3</td> </tr> <tr> <td>[予測値]</td> <td>6875 ※1</td> <td>LUMO(eV)</td> <td>※4</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td>ODDI</td> <td>2.91E-1~2.96E-1 ※5</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td>Qc</td> <td>※6</td> </tr> </table>				分子量	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
分子量	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																						

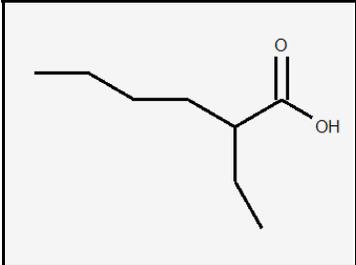
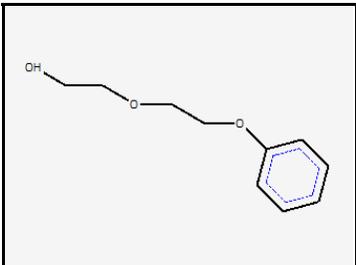
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
57	CAS番号 124-09-4 ヘキサメチレンジアミン 備考: 旧指定または旧2監通し番号:1019 アミン類		使用可	使用可	使用可	使用可
			70.7 mg/L	narcotic amines 362 mg/L	○Aliphatic Amines 273 mg/L Neutral Organic 2920 mg/L	primary amines aliphatic 326 mg/L
	分子量 116.21 logP(KowWin) 0.346 ※2 対水溶解(mg/L) 534300 ※1 logBCFmaxtox 2.58E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可	使用可	使用可
			27.2 mg/L	Reactive unspecified 6010 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	○Aliphatic Amines 26.8 mg/L Neutral Organic 1420 mg/L	primary amines aliphatic 39.2 mg/L
58	CAS番号 137-16-6 N-ラウロイルサルコシンNa塩 備考: 審査対象物質はNa塩だが酸に代替し予測		使用可	使用不可	使用可	使用不可
			107 mg/L	Reactive unspecified 3.47 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	○Amides -acid 25.6 mg/L Neutral Organic 2.90 mg/L	amides or imides 3.14 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
	分子量 271.4 logP(KowWin) 4.1 ※2 対水溶解(mg/L) 5.659 ※1 logBCFmaxtox 3.06E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 5.56E-1~9.36E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			29.7 mg/L	Reactive unspecified 2.06 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	○Amides -acid 10.7 mg/L Neutral Organic 2.00 mg/L	amides or imides 0.959 mg/L ※F:使用不能(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
59	CAS番号 1338-41-6 ソルビタンモノオクタデカノアート	魚類	使用可	使用可	使用不可	使用不可
			> 13.7 mg/L	esters 0.288 mg/L	Esters 0.232 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.0740 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	esters aliphatic 0.134 mg/L ※P, ※f:使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
59	備考: 	甲殻類	使用可	使用不可	使用不可	使用不可
			> 27.8 mg/L	Reactive unspecified 0.0745 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	Esters 0.311 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.0610 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	esters aliphatic 0.144 mg/L ※P, ※f:使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
	分子量 430.63 logP(KowWin) 6.1 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.39E+0 ※3 [予測値] 0.01218 ※1 LUMO(eV) 8.53E-1~1.48E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
60	CAS番号 2867-47-2 2-(N,N-ジメチルアミノ)エチル=メタクリレート	魚類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			19.1 mg/L	Reactive unspecified 559 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	○Aliphatic Amines 143 mg/L Methacrylates 152 mg/L Neutral Organic 1080 mg/L	methacrylates 56.2 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
60	備考: 旧指定または旧2監通し番号:1051 2-(ジメチルアミノ)エチル=メタクリレートとして予測アミン類	甲殻類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			33 mg/L	Reactive unspecified 879 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	○Aliphatic Amines 15.1 mg/L Methacrylates 114 mg/L Neutral Organic 559 mg/L	methacrylates 153 mg/L ※F:使用不能(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
61	CAS番号 89-78-1 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 ○Alcohols 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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4.76 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 12.8 mg/L ※f;使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 4.64 mg/L
62	CAS番号 121-44-8 トリエチルアミン 備考: PRTR:4 旧指定または旧2監通し番号:981 アミン類 	魚類	使用可 24 mg/L	使用可 narcotic amines 53.5 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 40.7 mg/L Neutral Organic 228 mg/L	使用可 secondary or tertiary amines 42.5 mg/L
		甲殻類	使用可 34 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 375 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 4.58 mg/L Neutral Organic 124 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 40.2 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)

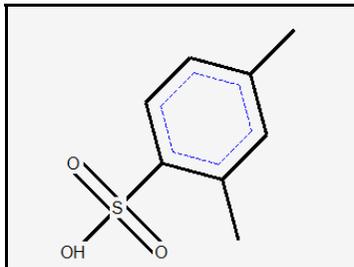
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
63	CAS番号 97-86-9 イソブチル=メタクリレート 備考: 	魚類	使用可 20 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 19.1 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OMethacrylates 8.55 mg/L Neutral Organic 28.9 mg/L	使用可 methacrylates 7.59 mg/L ※f:使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 23 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 19.1 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OMethacrylates 6.96 mg/L Neutral Organic 17.5 mg/L	使用可 methacrylates 19.7 mg/L ※f:使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
分子量 142.2 logP(KowWin) 2.675 ※2 対水溶解(mg/L) 438.6 ※1 logBCFmaxtox 2.E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -1.94E-1~4.12E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
64	CAS番号 108-91-8 シクロヘキシルアミン 備考: 旧指定または旧2監通し番号:1083 アミン類 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 narcotic amines 43.8 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 33.3 mg/L Neutral Organic 175 mg/L	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 3.80 mg/L Neutral Organic 95.9 mg/L	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) 63960 ※1 logBCFmaxtox 1.22E+0 ※3 [予測値] 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
65	CAS番号 144-62-7 シュウ酸	魚類	使用可 27 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 51200 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 168000 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 conjugated systems1 56.1 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	使用可 15 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 174000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 67500 mg/L ※N:構造適用範囲外
備考:						
分子量 90.04 logP(KowWin) -1.737 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.3E+0 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 3.18E-3~7.16E-2 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
66	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	魚類	信頼性あるデータなし	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	使用可 370 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 990 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 372 mg/L
備考:						
分子量 190.29 logP(KowWin) 1.274 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 9.51E-1 ※3 [予測値] 5602 ※1 LUMO(eV) 2.22E+0~2.76E+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
67	CAS番号 149-57-5 2-エチルヘキサン酸	魚類	使用可 180 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 19.3 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 163 mg/L ※N:構造適用範囲外	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 101 mg/L ※N:構造適用範囲外
備考: 旧指定または旧2監通し番号:1037						
分子量 144.22 logP(KowWin) 2.96 ※2 対水溶解(mg/L) 1111 ※1 logBCFmaxtox 2.21E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.08E+0~1.13E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
68	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	魚類	使用可 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:使用不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 1660 mg/L
			甲殻類	使用可 906 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1480 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 865 mg/L
備考:						
分子量 182.22 logP(KowWin) 0.826 ※2 対水溶解(mg/L) 34260 ※1 logBCFmaxtox 6.16E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) 2.31E-1~6.13E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

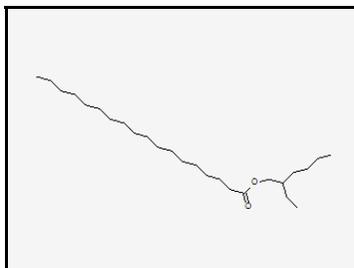
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
69	CAS番号 1300-72-7 ナトリウム＝ジメチルベンゼンスルホナート	魚類	使用可 > 408 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3260 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 111000 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 acids 9400 mg/L ※P, ※F:使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			甲殻類	使用可 > 318.24 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7890 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 51900 mg/L ※N:構造適用範囲外
71	CAS番号 91031-48-0 Fatty acids, C16-18, 2-ethylhexyl esters	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 esters 162 mg/L	使用不可 Esters 0.000132 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 7.87e-7 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 esters aliphatic 0.0000251 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 618 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters 0.0000984 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.00000108 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)

備考:
審査対象物質はNa塩だが酸に代替し、Benzenesulfonic acid, 2,4-dimethyl-として予測

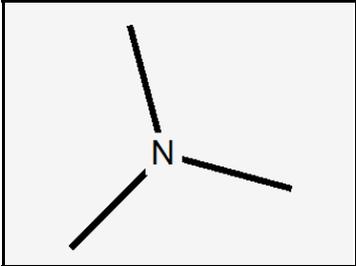
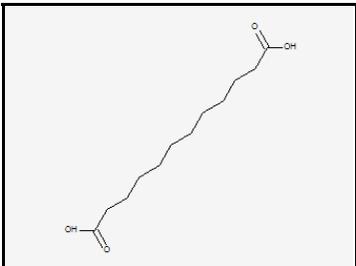


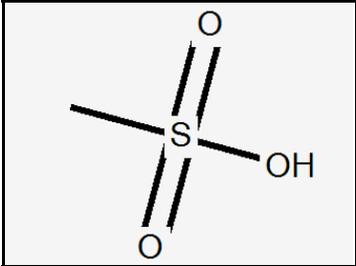
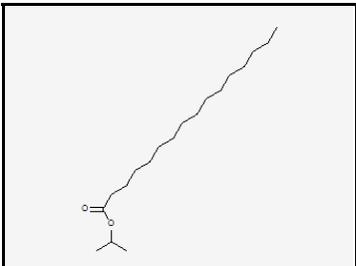
分子量	186.23	logP(KowWin)	-0.07 ※2
対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	-5.25E-2 ※3
[予測値]	58940 ※1	LUMO(eV)	-8.46E-1 ~ -7.39E-1 ※4
		ODDI	※5
		Qc	※6

備考:
C=18として予測



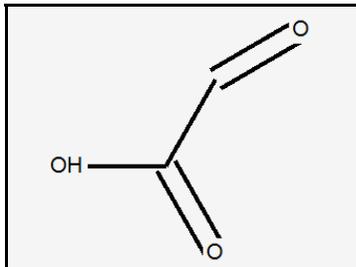
分子量	396.7	logP(KowWin)	11.595 ※2
対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	1.27E+0 ※3
[予測値]	0.0000004022 ※1	LUMO(eV)	1.17E+0 ~ 1.22E+0 ※4
		ODDI	※5
		Qc	※6

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
72	CAS番号 75-50-3 トリメチルアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 narcotic amines 294 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 221 mg/L Neutral Organic 2800 mg/L	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 20.9 mg/L Neutral Organic 1330 mg/L	使用可 secondary or tertiary amines 36.9 mg/L ※f:使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
73	CAS番号 693-23-2 ドデカン二酸 備考: 	魚類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 18.6 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 167 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 50.5 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 13.7 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 106 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 59.0 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
74	CAS番号 75-75-2 メタンスルホン酸	魚類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 136000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 6800000 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 acids 234000 mg/L ※P, ※F:使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 2580000 mg/L ※N:構造適用範囲外
74	備考: 					
	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					
75	CAS番号 142-91-6 イソプロピル=ヘキサデカノアート	魚類	> 10000 mg/L	使用可 esters 0.749 mg/L	使用不可 Esters 0.0100 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.000724 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 esters aliphatic 0.00386 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	> 0.54 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.300 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters 0.0110 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.000726 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
75	備考: 					
	分子量 298.51 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.001354 ※1 logP(KowWin) 8.157 ※2 logBCFmaxtox 3.82E+0 ※3 LUMO(eV) 1.23E+0~1.28E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

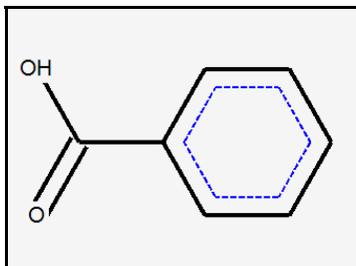
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
76	CAS番号 298-12-4 グリオキシル酸	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 15100 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAldehydes (Mono) 256 mg/L Neutral Organic 69200 mg/L	使用不可 conjugated systems1 30.6 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	使用可 51 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 54200 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAldehydes (Mono) 2250 mg/L Neutral Organic 28700 mg/L
77	CAS番号 532-32-1 ナトリウム=ベンゾアート	魚類	使用可 484 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 62.8 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 1300 mg/L ※N;構造適用範囲外	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 730 mg/L ※N;構造適用範囲外

備考:

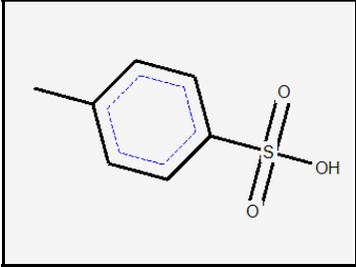
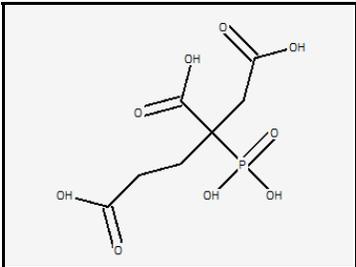


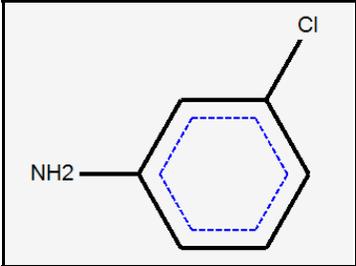
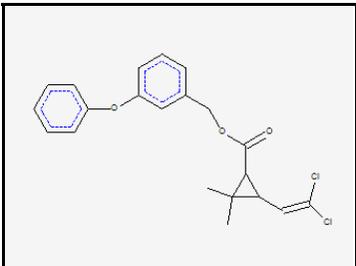
分子量 74.04 logP(KowWin) -1.403 ※2
 対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logBCFmaxtox -1.05E+0 ※3
 [予測値] LUMO(eV) -9.51E-1~-8.44E-1 ※4
 ODDI ※5
 Qc ※6

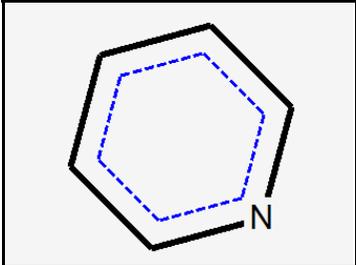
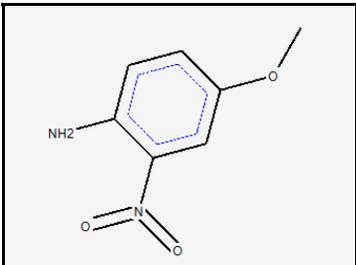
備考:
 審査対象物質はNa塩だが
 酸に代替し予測

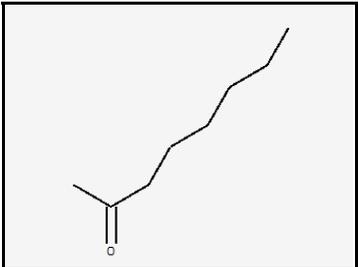
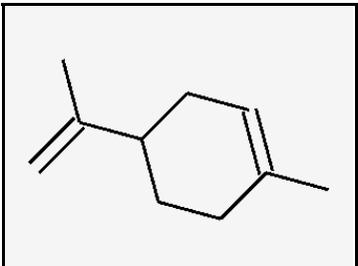


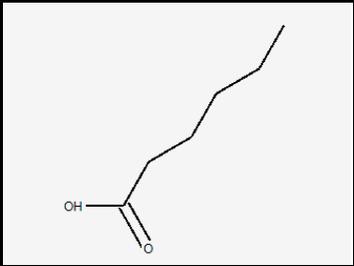
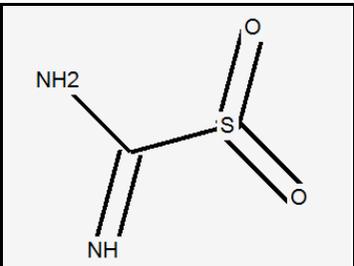
分子量 122.12 logP(KowWin) 1.874 ※2
 対水溶解(mg/L) 2493 ※1 logBCFmaxtox 1.4E+0 ※3
 [予測値] LUMO(eV) -5.66E-1~-3.01E-1 ※4
 ODDI ※5
 Qc ※6

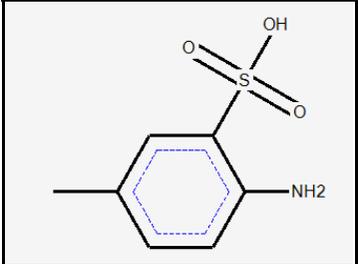
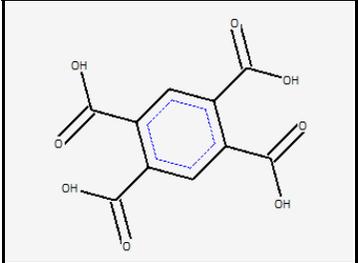
#	化学物質	対象	毒性値						
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9			
78	CAS番号 657-84-1 p-トルエンスルホン酸ナトリウム 備考: 審査対象物質はNa塩だが酸に代替し予測 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8300 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 317000 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 acids 21800 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)			
		甲殻類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 23600 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 142000 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 acids 306 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)			
			分子重	172.2	logP(KowWin)	-0.618 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	-4.61E-1 ※3			
			[予測値]	202300 ※1	LUMO(eV)	-8.77E-1 ~ -8.07E-1 ※4			
					ODDI	※5			
					Qc	※6			
79	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 4290000 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 phosphates 685000 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 294000 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)			
		甲殻類	使用可 265 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 205000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 1740000 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 phosphates 10600 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 16400 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)			
			分子重	270.13	logP(KowWin)	-1.659 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	-1.01E+0 ※3			
			[予測値]	1000000 ※1	LUMO(eV)	-4.5E-1 ~ 2.11E-1 ※4			
					ODDI	※5			
					Qc	※6			

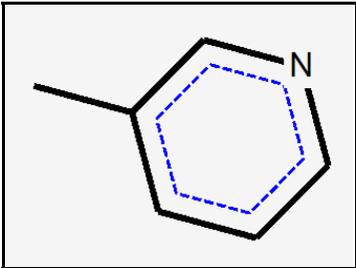
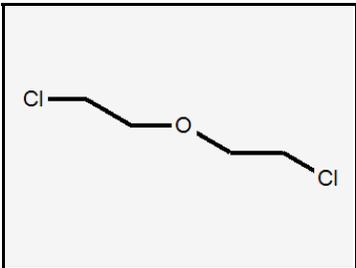
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
80	CAS番号 108-42-9 m-クロロアニリン 備考: 旧指定または旧2監通し番号:405 旧3監通し番号:18 アミン類 	魚類	使用可 8.79 mg/L	使用可 phenols and anilines 47.5 mg/L	使用可 ○Anilines (Unhindered) 28.5 mg/L Neutral Organic 187 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols3 7.55 mg/L
		甲殻類	使用可 0.493 mg/L	使用不可 phenols and anilines 20.9 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.918 mg/L Neutral Organic 103 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols3 1.14 mg/L
81	CAS番号 52645-53-1 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(別名ペルメトリン) 備考: 旧3監通し番号:40 	魚類	使用可 0.00252 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.171 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 0.0350 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Vinyl/Allyl Halides 0.000882 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) ○ Pyrethroids 0.000354 mg/L Neutral Organic 0.00400 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 0.0410 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Vinyl/Allyl Halides 0.00103 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) ○ Pyrethroids 0.000220 mg/L Neutral Organic 0.00400 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	QSARモデルなし

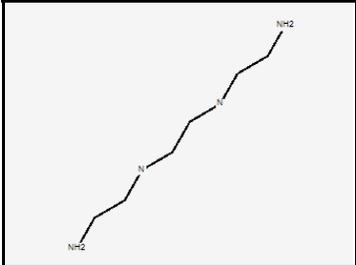
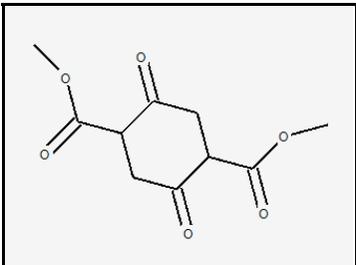
#	化学物質	対象	毒性値				
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9	
82	CAS番号 110-86-1 ピリジン 備考: 旧指定または旧2監通し番号:1095		魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 406 mg/L	使用可 Neutral Organics 770 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 210 mg/L
			甲殻類	使用可 180 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 657 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 391 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 69.1 mg/L
	分子量 79.1 logP(KowWin) 0.804 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 6.E-1 ※3 [予測値] 729800 ※1 LUMO(eV) 1.39E-1~1.39E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
83	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 Neutral Organic 112 mg/L	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;使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 1.20 mg/L Neutral Organic 64.5 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols3 1.50 mg/L
	分子量 168.15 logP(KowWin) 2.099 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.57E+0 ※3 [予測値] 1383 ※1 LUMO(eV) -8.89E-1~-8.79E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

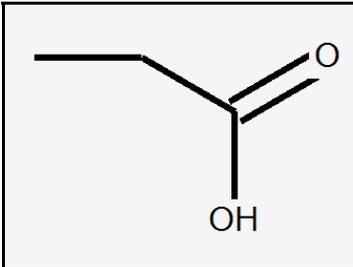
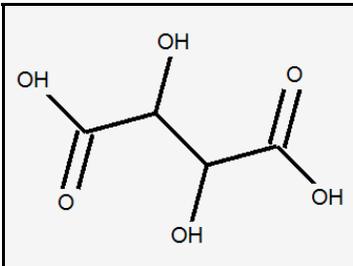
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
86	CAS番号 111-13-7 2-オクタノン 備考: 	魚類	使用可 36 mg/L	使用可 basesurface narcotics 63.0 mg/L	使用可 Neutral Organics 66.8 mg/L	使用可 Oketones 63.8 mg/L Neutral Organics 79.8 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 basesurface narcotics 60.7 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 38.7 mg/L	使用可 Neutral Organics 22.1 mg/L
	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					
87	CAS番号 138-86-3 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 Ohydrocabons 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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.238 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 0.402 mg/L Neutral Organics 0.454 mg/L
	分子量 136.24 logP(KowWin) 4.827 ※2 対水溶解(mg/L) 4.581 ※1 logBCFmaxtox 3.59E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.16E+0~1.28E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

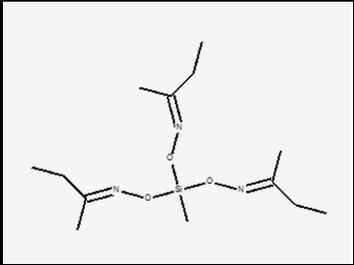
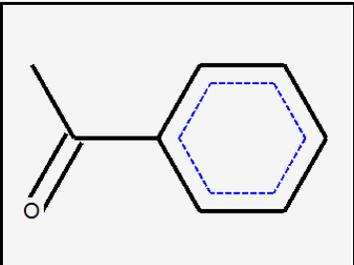
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
88	CAS番号 142-62-1 ヘキサン酸 備考: 	魚類	使用可 88 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 83.7 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 858 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 167 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 82.6 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 490 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 52.8 mg/L
	分子量 116.16 対水溶解(mg/L) [予測値] 5898 ※1 logP(KowWin) 2.051 ※2 logBCFmaxtox 1.53E+0 ※3 LUMO(eV) 1.03E+0~1.07E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
89	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 23400 mg/L Neutral Organic 1320000 mg/L	使用不可 Unclassified 90400 mg/L 使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 1620 mg/L Neutral Organic 486000 mg/L	使用不可 Unclassified 5570 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
	分子量 108.12 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -2.644 ※2 logBCFmaxtox -1.97E+0 ※3 LUMO(eV) -1.59E+0~-1.56E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

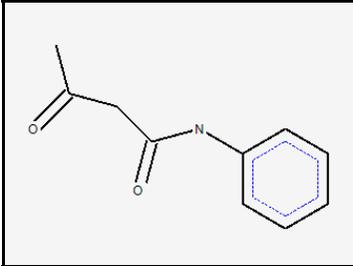
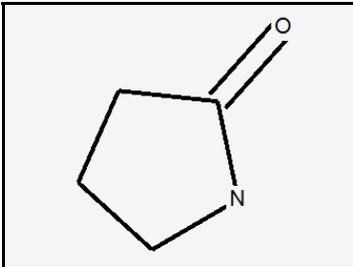
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
90	CAS番号 88-44-8 2-アミノ-5-メチルベンゼンスルホン酸 備考: アミン類 	魚類	使用可 > 10 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 57400 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (Unhindered)-acid 77300 mg/L Neutral Organic 230000 mg/L	使用不可 amines aromatic or phenols5 12400 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 21 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 201000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (Unhindered)-acid 14.5 mg/L Neutral Organic 94200 mg/L	使用不可 amines aromatic or phenols5 217 mg/L ※P, ※F;使用不能(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) logBCFmaxtox -1.15E+0 ※3 [予測値] 10380 ※1 LUMO(eV) -5.67E-1~-5.54E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
91	CAS番号 89-05-4 1, 2, 4, 5-ベンゼンテトラカルボン酸 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1790 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 96000 mg/L ※N;構造適用範囲外	使用不可 acids 8880 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 63 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4910 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 46000 mg/L ※N;構造適用範囲外	使用可 acids 306 mg/L
分子量 254.15 logP(KowWin) 0.149 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.11E-1 ※3 [予測値] 16750 ※1 LUMO(eV) -2.03E+0~-1.92E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

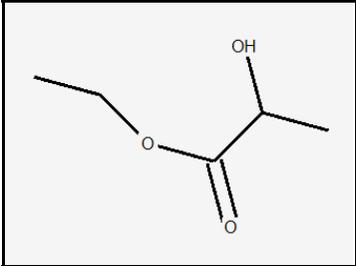
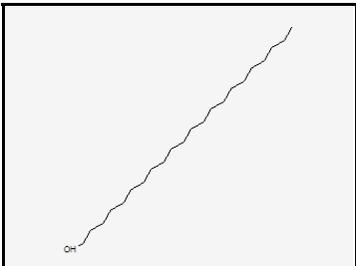
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
94	CAS番号 108-99-6 3-メチルピリジン 備考: 	魚類	使用可 144 mg/L	使用可 basesurface narcotics 171 mg/L	使用可 Neutral Organics 292 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 111 mg/L
		甲殻類	使用可 34 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 237 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 156 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 37.5 mg/L
			分子量 93.13	logP(KowWin) 1.352 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 1.01E+0 ※3		
			[予測値] 230300 ※1	LUMO(eV) 1.33E-1~1.33E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
95	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 Neutral Organic 294 mg/L	使用不可 Unclassified 85.3 mg/L 使用不能(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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organic 160 mg/L	使用不可 Unclassified 24.0 mg/L 使用不能(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)	logBCFmaxtox 1.16E+0 ※3		
			[予測値] 6435 ※1	LUMO(eV) 9.2E-1~1.4E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

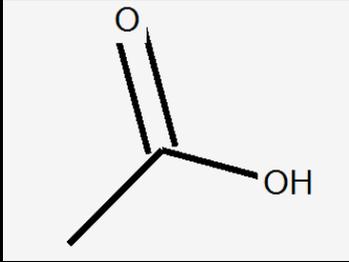
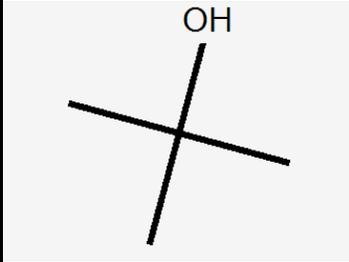
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
96	CAS番号 112-24-3 トリエチレンテトラミン 備考: 旧指定または旧2監通し番号:982 アミン類 	魚類	使用可 570 mg/L	使用可 narcotic amines 43000 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 31700 mg/L Neutral Organic 1790000 mg/L	使用不可 primary amines aliphatic 23100 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 31.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3990000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 2200 mg/L Neutral Organic 661000 mg/L	使用不可 primary amines aliphatic 5310 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
97	CAS番号 6289-46-9 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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 6520 mg/L Neutral Organic 718000 mg/L	使用不可 esters aliphatic 19400 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 660000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 20800 mg/L Neutral Organic 282000 mg/L	使用不可 esters aliphatic 28500 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)

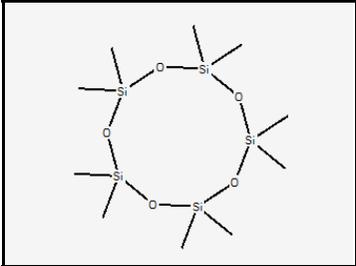
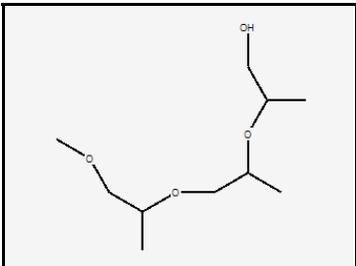
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
98	CAS番号 79-09-4 プロピオン酸 備考: 	魚類	使用可 51 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 855 mg/L 使用不能 (信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 11500 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 1260 mg/L
		甲殻類	使用可 22.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1280 mg/L 使用不能 (信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 5740 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 71.5 mg/L
99	CAS番号 87-69-4 酒石酸 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 21200 mg/L 使用不能 (信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 612000 mg/L ※N:構造適用範囲外	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 使用不能 (信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 263000 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 conjugated systems1 254 mg/L

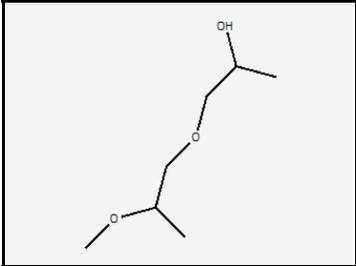
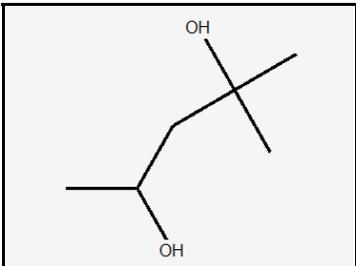
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
104	CAS番号 22984-54-9 メチルトリス(エチルメチルケトオキシム)シラン 備考: 	魚類	使用可 13.2 mg/L > 120 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 13.2 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.0000229 mg/L ※P, ※N;使用不能(logP及び構造適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.000114 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 9.22 mg/L > 120 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.22 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.0000268 mg/L ※P, ※N;使用不能(logP及び構造適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.000638 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
	分子量 301.46 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.00004823 ※1 logP(KowWin) 9.833 ※2 logBCFmaxtox 2.59E+0 ※3 LUMO(eV) 6.8E-1~9.99E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
105	CAS番号 98-86-2 アセトフェノン 備考: 	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 134 mg/L 528 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 134 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 107 mg/L	使用可 Neutral Organics 47.2 mg/L
	分子量 120.15 対水溶解(mg/L) [予測値] 4484 ※1 logP(KowWin) 1.674 ※2 logBCFmaxtox 1.25E+0 ※3 LUMO(eV) -3.54E-1~1.37E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

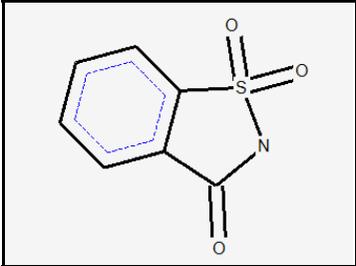
#	化学物質	対象	毒性値						
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9			
106	CAS番号 102-01-2 アセト酢酸アニリド 備考: 	魚類	使用可 297 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 549 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Amides 271 mg/L Neutral Organic 1130 mg/L	使用可 amides or imides 315 mg/L ※f;使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)			
		甲殻類	使用可 116 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 877 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Amides 472 mg/L Neutral Organic 587 mg/L	使用不可 amides or imides 215 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)			
			分子重	177.2	logP(KowWin)	1.008 ※2			
			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			
107	CAS番号 616-45-5 2-ピロリドン 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 Neutral Organic 8430 mg/L	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;使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Amides 3700 mg/L Neutral Organic 3870 mg/L	使用不可 amides or imides 1260 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)			
			分子重	85.11	logP(KowWin)	-0.317 ※2			
			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			

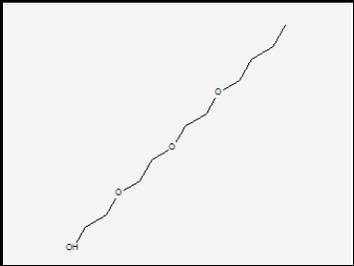
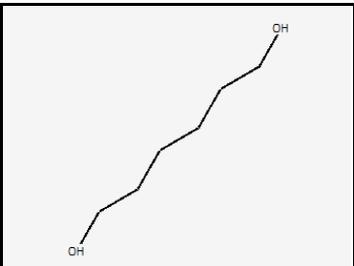
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
108	CAS番号 687-47-8 乳酸エチル 備考: 	魚類	使用可 320 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4440 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 297 mg/L Neutral Organic 8860 mg/L	使用不可 conjugated systems1 10.9 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 683 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9020 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 781 mg/L Neutral Organic 4110 mg/L	使用不可 conjugated systems1 36.9 mg/L ※F;使用不能(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		
110	CAS番号 661-19-8 1-ドコサノール 備考: 	魚類	使用可 > 1000 mg/L	使用可 basesurface narcotics 33.3 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.0000339 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.000164 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.000118 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 basesurface narcotics 14.6 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.0000391 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.00260 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.000704 mg/L ※P;使用不能(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		

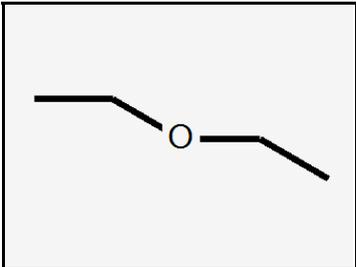
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
111	111 カリウム＝アセテート CAS番号 127-08-2 備考: 審査対象物質はK塩だが 酸に代替し予測  分子量 60.05 logP(KowWin) 0.087 ※2 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 6.48E-2 ※3 [予測値] 475900 ※1 LUMO(eV) 1.02E+0~1.02E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 992.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1720 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 25800 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 acids 2330 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 919 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2960 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 12300 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 74.5 mg/L
112	112 2-メチルプロパン-2-オール(別名:tert-ブチルアルコール) CAS番号 75-65-0 備考: 旧指定または旧2監通し番 号:703  分子量 74.12 logP(KowWin) 0.73 ※2 対水溶解(mg/L) 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	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:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 425 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 296 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 121 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
113	113 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	使用可 > 0.016 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.422 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.00143 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.00371 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 0.139 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.00140 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.0105 mg/L 使用不能(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						
114	114 CAS番号 25498-49-1 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	信頼性あるデータなし	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;使用留意(麻酔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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 7470 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 3240 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 1390 mg/L ※P, ※F;使用不能(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						

#	化学物質	対象	毒性値				
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9	
115	115 CAS番号 34590-94-8 1(又は2)-[2-メトキシ(メチル)エトキシ]プロパノール 備考: 1-(2-メトキシ-2-メチルエトキシ)-2-プロパノールとして予測 	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;使用留意(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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 7120 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 2870 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 1240 mg/L ※P, ※F;使用不能(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	
116	116 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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 911 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 589 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 243 mg/L ※P;使用不能(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
117	CAS番号 128-44-9 Saccharin, sodium deriv. 備考: 審査対象物質はNa塩だが酸に代替し予測 	魚類	使用可 18300 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1010 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Thiazolones (Iso-) 1.33 mg/L Amides 704 mg/L Neutral Organic 3720 mg/L	使用可 amides or imides 808 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 2250 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Thiazolones (Iso-) 1.76 mg/L Amides 1580 mg/L Neutral Organic 1830 mg/L	使用不可 amides or imides 638 mg/L ※P, ※F, 使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 183.18 logP(KowWin) 0.449 ※2 対水溶解(mg/L) 789.2 ※1 logBCFmaxtox 3.35E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) -1.29E+0~-1.29E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
120	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, 使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 194000 mg/L ※P, 使用不能(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, 使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 115000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 22800 mg/L ※P, ※f, 使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 10400 mg/L ※P, 使用不能(logP適用範囲外)
	分子量 150.18 logP(KowWin) -1.748 ※2 対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logBCFmaxtox -1.3E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 2.04E+0~2.7E+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
121	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:  分子量 206.28 logP(KowWin) 0.018 ※2 対水溶解(mg/L) 126900 ※1 logBCFmaxtox 1.33E-2 ※3 [予測値] LUMO(eV) 2.04E+0~2.73E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	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 Oalcohols 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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4830 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 2340 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外,麻酔作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 992 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
122	CAS番号 629-11-8 1, 6-ヘキサンジオール 備考:  分子量 118.18 logP(KowWin) 0.765 ※2 対水溶解(mg/L) 22650 ※1 logBCFmaxtox 5.71E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) 3.25E+0~3.59E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 basesurface narcotics 2420 mg/L	使用可 Neutral Organics 1250 mg/L	使用可 Oalcohols aliphatic 2390 mg/L Neutral Organics 1210 mg/L
		甲殻類	使用可 > 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;使用不能(logP適用範囲外) O Neutral Organics 184 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
127	CAS番号 60-29-7 ジエチルエーテル 備考: 	魚類	使用可 2560 mg/L	使用可 basesurface narcotics 795 mg/L	使用可 Neutral Organics 435 mg/L	使用可 Oethers aliphatic 762 mg/L Neutral Organics 440 mg/L
		甲殻類	使用可 1378.63 mg/L	使用可 basesurface narcotics 766 mg/L	使用可 Neutral Organics 226 mg/L	使用可 Neutral Organics 74.9 mg/L
			分子量 74.12	logP(KowWin) 1.049 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 7.83E-1 ※3		
			[予測値] 23240 ※1	LUMO(eV) 2.98E+0~3.13E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

予測値の選択

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

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

また、予測結果の信頼性が低い以下のクラスは使用不可とした

- ※TIMES : Reactive Unspecified
- ※KATE : Unclassified

※1 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 α , β -unsaturated alcohols

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

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

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

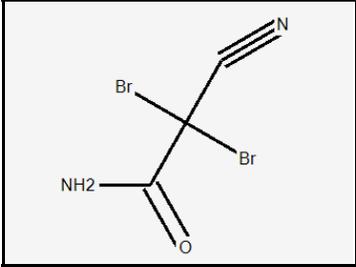
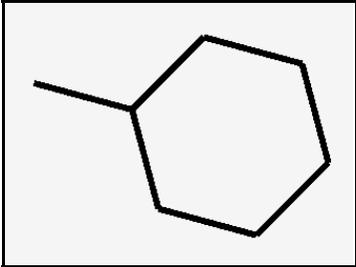
※P: 予測物質のlogPが、予測物質が分類されるクラスの参照物質のlogP集合から外れており、回帰式の有効範囲外である。<使用不可>

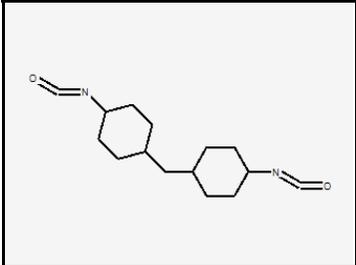
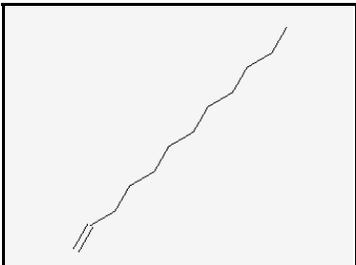
※D: Out of Domain (TIMES) <使用不可>

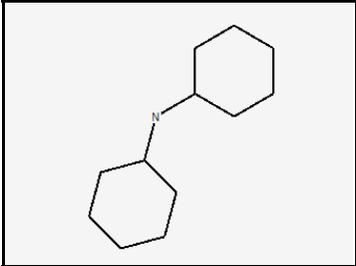
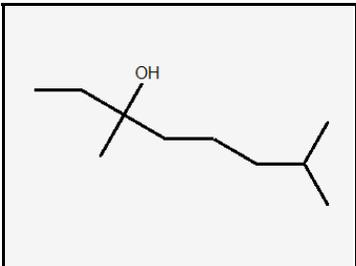
※N: Not Related to an Existing ECOSAR Class Definition (ECOSAR)<使用不可>

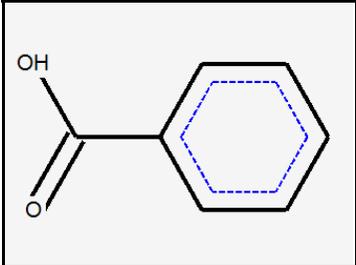
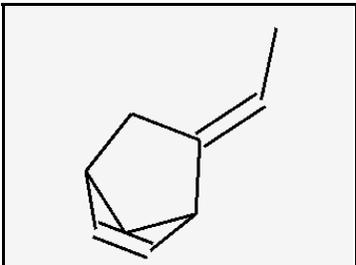
※F: 予測物質の部分構造について、予測物質が分類されるクラス及びNeutralOrganicsクラス(麻酔作用で毒性を説明可能なクラス)の参照物質の部分構造集合に含まれないため、回帰式の適用範囲外である。(KATE)<使用不可>

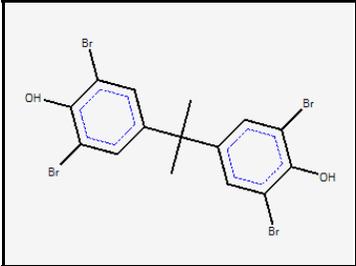
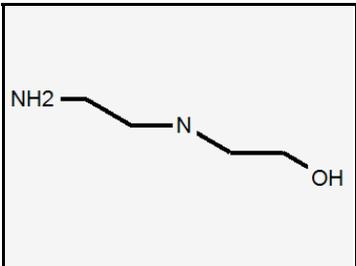
※f: 予測物質の部分構造について、予測物質が分類されるクラスの参照物質に含まれない部分構造を持つが、当該部分構造はNeutralOrganicsクラス(単純な麻酔作用のみで毒性が説明される)の参照物質の部分構造集合に含まれるため、予測結果の使用においては部分構造について留意する必要がある。(KATE)<使用留意>

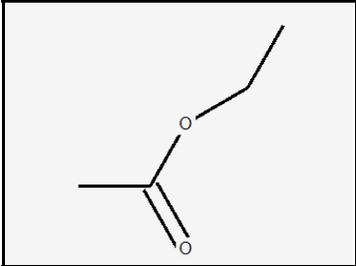
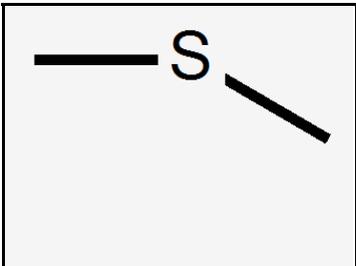
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
3	CAS番号 2, 2-ジブロモ-2-シアノアセトアミド 備考: 旧3監通し番号:183  分子重 241.87 logP(KowWin) 1.007 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 7.51E-1 ※3 [予測値] 2841 ※1 LUMO(eV) -1.22E+0~-1.09E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.55mg/L	使用不可 Reactive unspecified 480 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Haloacetamides 25.9 mg/L ○ Halo Nitriles 1.57 mg/L Neutral Organic 1550 mg/L	使用不可 halides1 6.35 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.9mg/L	使用不可 Reactive unspecified 908 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Haloacetamides 49.2 mg/L ○ Halo Nitriles 0.813 mg/L Neutral Organic 803 mg/L	使用不可 halides1 3.34 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
4	CAS番号 メチルシクロヘキサン 備考: 旧3監通し番号:213  分子重 98.19 logP(KowWin) 3.593 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.68E+0 ※3 [予測値] 28.4 ※1 LUMO(eV) 3.61E+0~3.67E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 2.1mg/L	使用可 basesurface narcotics 11.7 mg/L	使用可 Neutral Organics 2.99 mg/L	使用可 ○hydrocarbons aliphatic 3.63 mg/L Neutral Organics 4.35 mg/L
		甲殻類	使用可 0.33mg/L	使用不可 basesurface narcotics 4.94 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1.97 mg/L	使用可 ○hydrocarbons aliphatic 1.20 mg/L Neutral Organics 2.12 mg/L

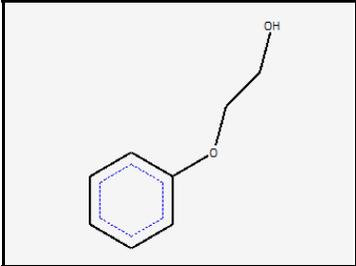
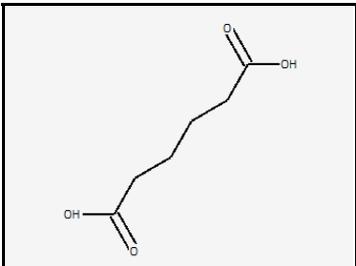
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
5	CAS番号 メチレンビス(4, 1-シクロヘキシレン)＝ジイソシアネート 備考: 旧3監通し番号:232  分子量 262.35 logP(KowWin) 6.115 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.4E+0 ※3 [予測値] 0.1211 ※1 LUMO(eV) 4.86E-1～6.99E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 1.2mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.113 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.0430 mg/L ※P, ※N;使用不能(logP及び構造適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.0604 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 0.0405 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 0.0360 mg/L ※P, ※N;使用不能(logP及び構造適用範囲外)	使用不可 Unclassified 0.0883 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
6	CAS番号 ドデカー１－エン 備考: 旧3監通し番号:268  分子量 168.33 logP(KowWin) 6.098 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.39E+0 ※3 [予測値] 0.1127 ※1 LUMO(eV) 1.35E+0～1.4E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 basesurface narcotics 0.106 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.0290 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 hydrocarbons aliphatic 0.0804 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.0600 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 basesurface narcotics 0.0333 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.0240 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 hydrocarbons aliphatic 0.115 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.0820 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)

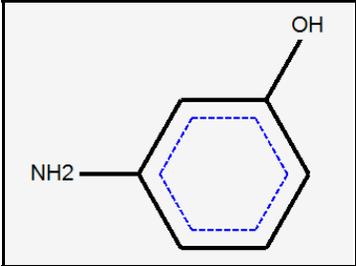
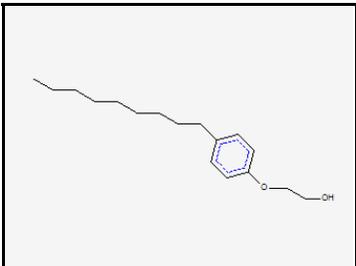
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
7	CAS番号 N, N-ジシクロヘキシルアミン 備考: 旧指定または旧2監通し番号:1084 旧3監通し番号:275 アミン類 	魚類	使用可 12mg/L	使用可 narcotic amines 1.26 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 0.971 mg/L Neutral Organic 1.12 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 0.806 mg/L ※P, ※f使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 8mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.49 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 0.152 mg/L Neutral Organic 0.788 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 30.0 mg/L ※P, ※f使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
8	CAS番号 78-69-3 3, 7-ジメチルオクタン-3-オール 備考: 官報公示整理番号:2-217 	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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3.11 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 9.36 mg/L ※f;使用留意(麻醉作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 3.36 mg/L

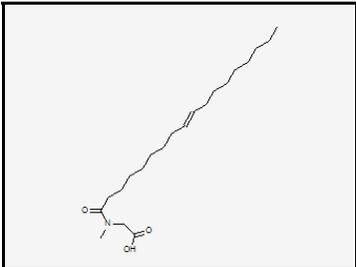
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
9	CAS番号 65-85-0 安息香酸 備考: 官報公示整理番号:3-1397 	魚類	使用可 44.6mg/L	使用不可 Reactive unspecified 62.8 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 1300 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 237 mg/L
		甲殻類	使用可 > 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 83.6 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 730 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 60.8 mg/L
10	CAS番号 5-エチリデンビシクロ[2.2.1]ヘプタ-2-エン 備考: 旧指定または旧2監通し番号:710 旧3監通し番号:79 	魚類	使用可 7mg/L	使用可 basesurface narcotics 4.27 mg/L	使用可 Neutral Organics 3.10 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 3.86 mg/L Neutral Organics 4.55 mg/L
		甲殻類	使用可 3.3mg/L	使用不可 basesurface narcotics 2.63 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2.06 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 1.34 mg/L Neutral Organics 2.29 mg/L

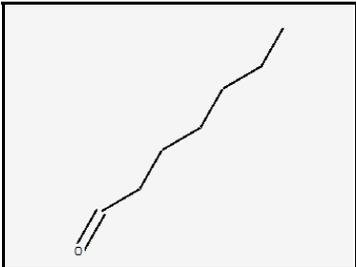
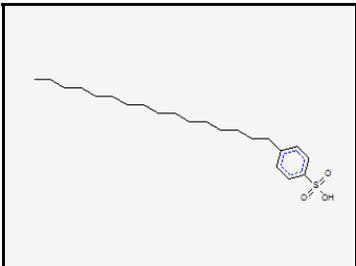
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
11	CAS番号 2, 2', 6, 6' -テトラブロモ-4, 4' -(プロパン-2, 2-ジイル)ジフェノール 備考: 旧3監通し番号:10  分子量 543.88 logP(KowWin) 7.203 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.39E+0 ※3 [予測値] 0.001002 ※1 LUMO(eV) -4.83E-1 ~ -4.28E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 9.19mg/L	使用可 phenols and anilines 0.134 mg/L	使用不可 Phenols, Poly 0.0230 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.00900 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 amines aromatic or phenols2(ClogP) 3.62 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 7.87mg/L	使用不可 phenols and anilines 0.592 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用不可 Phenols, Poly 0.0230 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.00900 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 amines aromatic or phenols2(ClogP) 7.86 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
12	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: 官報公示整理番号:2-304 アミン類  分子量 104.15 logP(KowWin) -2.126 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.59E+0 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 640mg/L	使用可 narcotic amines 13900 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 10300 mg/L Neutral Organic 435000 mg/L	使用不可 primary amines aliphatic 8170 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 22mg/L	使用不可 Reactive unspecified 958000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 759 mg/L Neutral Organic 169000 mg/L	使用不可 primary amines aliphatic 1680 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)

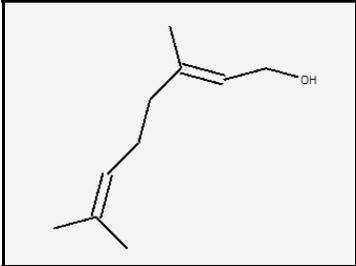
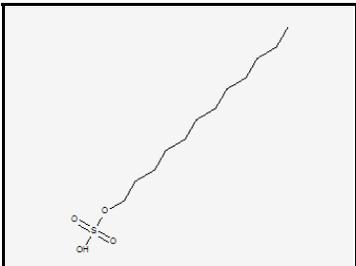
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
13	CAS番号 141-78-6 酢酸エチル 備考: 官報公示整理番号:2-726 	魚類	使用可 > 75.6mg/L	使用可 esters 125 mg/L	使用可 OEsters 54.3 mg/L Neutral Organic 758 mg/L	使用可 esters aliphatic 90.7 mg/L
		甲殻類	使用可 2500mg/L	使用不可 Reactive unspecified 835 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 127 mg/L Neutral Organic 388 mg/L	使用可 esters aliphatic 119 mg/L
			分子量 88.11	logP(KowWin) 0.864 ※2		
			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		
14	CAS番号 75-18-3 硫化ジメチル 備考: 官報公示整理番号:2-466 	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;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 29mg/L	使用不可 basesurface narcotics 497 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 245 mg/L	QSARモデルなし
			分子量 62.13	logP(KowWin) 0.919 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 6.86E-1 ※3		
			[予測値] 22490 ※1	LUMO(eV) 9.34E-1~9.34E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

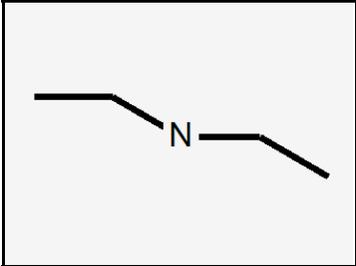
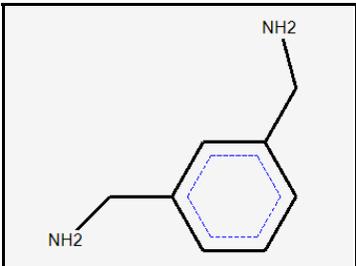
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
15	CAS番号 122-99-6 エチレングリコールモノフェニルエーテル(別名:2-フェノキシエタノール) 備考: 官報公示整理番号:3-558 	魚類	使用可 344mg/L	使用可 basesurface narcotics 422 mg/L	使用可 Neutral Organics 730 mg/L	使用可 ethers with aromatic 446 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 743 mg/L
		甲殻類	使用可 488mg/L	使用不可 basesurface narcotics 619 mg/L ※D;使用不能(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;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 129 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
16	CAS番号 124-04-9 アジピン酸 備考: 官報公示整理番号:2-858 	魚類	使用可 > 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2900 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 46900 mg/L ※N;構造適用範囲外	使用不可 acids 4470 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 85.7mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4990 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 22600 mg/L ※N;構造適用範囲外	使用可 acids 169 mg/L

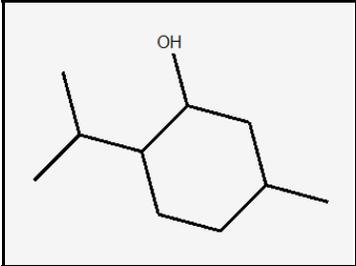
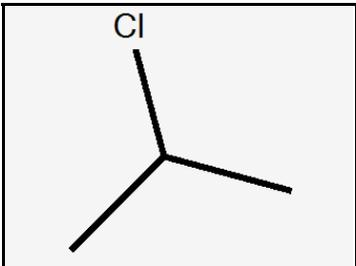
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
17	CAS番号 m-アミノフェノール 備考: 旧指定または旧2監通し番号:903 旧3監通し番号:11 アミン類 	魚類	使用可 121mg/L	使用可 phenols and anilines 543 mg/L	使用可 Anilines (Unhindered) 260 mg/L Phenols 409 mg/L ○ Phenol Amines 22.3 mg/L Neutral Organic 3380 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols4 386 mg/L
		甲殻類	使用可 0.447mg/L	使用不可 phenols and anilines 106 mg/L ※D;使用不能(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 Neutral Organic 1630 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols1 0.721 mg/L
18	CAS番号 α-[(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル]-ω-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: 旧3監通し番号:42 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 ○ethers 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;使用不能(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;使用不能(部分構造適用範囲外) Neutral Organics 18.3 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)

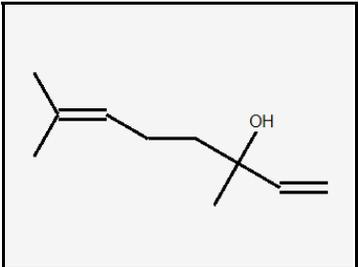
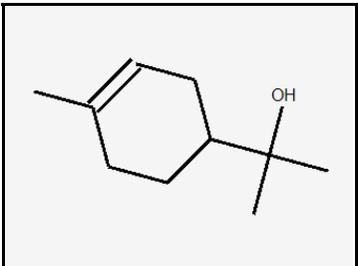
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
19	CAS番号 110-25-8 オレオイルザルコシン 備考: 	魚類	使用可 > 0.43mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.124 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Amides -acid 0.371 mg/L Neutral Organic 0.0130 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 amides or imides 0.0480 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	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

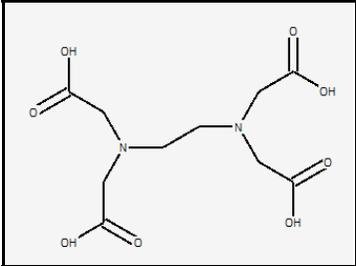
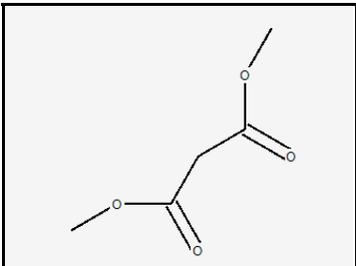
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
21	CAS番号 111-71-7 ヘプタナール 備考: 	魚類	使用可 12mg/L	使用可 aldehydes 6.11 mg/L	使用可 OAldehydes (Mono) 4.60 mg/L Neutral Organic 51.5 mg/L	使用可 aldehydes 4.88 mg/L
		甲殻類	使用可 4.13mg/L	使用不可 Reactive unspecified 46.5 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAldehydes (Mono) 6.43 mg/L Neutral Organic 30.1 mg/L	使用可 aldehydes 4.47 mg/L
分子量 114.19 logP(KowWin) 2.29 ※2 対水溶解(mg/L) 1167 ※1 logBCFmaxtox 1.71E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI 2.88E-1~2.9E-1 ※5 Qc ※6						
22	CAS番号 68584-22-5 アルキル(C10~16)ベンゼンスルホン酸 備考: C=16として予測 	魚類	使用可 3mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3.64 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics-acid 59.0 mg/L	使用不可 acids 22.9 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 2.9mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2.94 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics-acid 39.6 mg/L	使用不可 acids 55.4 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
分子量 298.44 logP(KowWin) 3.802 ※2 対水溶解(mg/L) 7.098 ※1 logBCFmaxtox 2.84E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -8.73E-1~-8.24E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

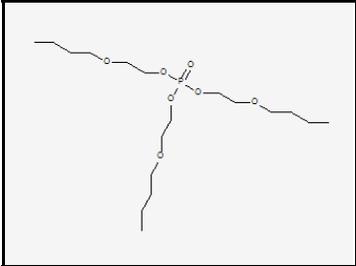
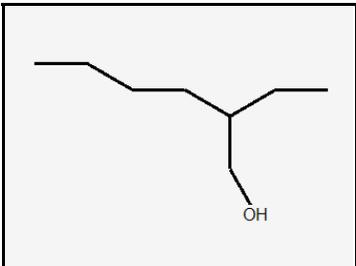
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
23	CAS番号 106-24-1 ゲラニオール 備考: 	魚類	使用可 22mg/L	使用不可 a,b-unsaturated alcohols 0.331 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 OVinyl/Allyl Alcohols 1.80 mg/L Neutral Organic 6.06 mg/L	使用不可 conjugated systems2 1.31 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 10.8mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4.86 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OVinyl/Allyl Alcohols 0.283 mg/L Neutral Organic 3.94 mg/L	使用不可 conjugated systems2 2.87 mg/L ※F;使用不能(部分構造適用範囲外)
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						
24	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: 審査対象物質はNa塩だが 酸に代替し予測 	魚類	使用可 29mg/L	使用不可 Reactive unspecified 47.5 mg/L 使用不能(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;使用不能(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 使用不能(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;使用不能(部分構造適用範囲外)
分子量 266.4 logP(KowWin) 2.422 ※2 対水溶解(mg/L) 163.7 ※1 logBCFmaxtox 1.81E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -6.42E-1~-5.46E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

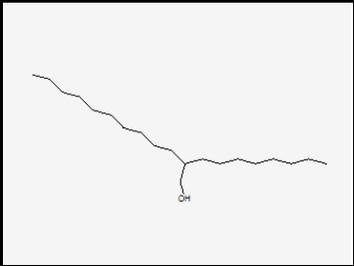
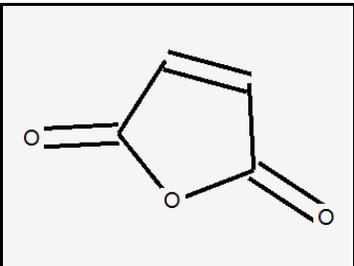
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
25	CAS番号 109-89-7 ジエチルアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 > 100mg/L	使用可 narcotic amines 113 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 85.1 mg/L Neutral Organic 704 mg/L	使用可 secondary or tertiary amines 94.1 mg/L
		甲殻類	使用可 56mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1350 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)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

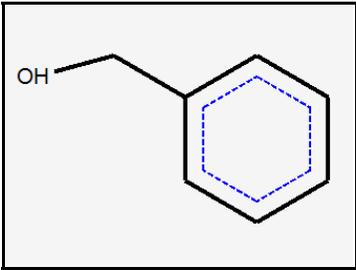
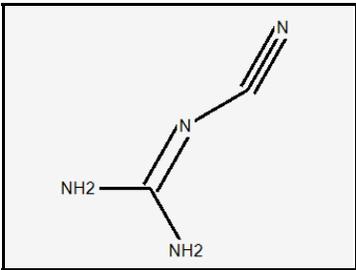
#	化学物質	対象	毒性値				
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9	
27	CAS番号 2216-51-5 (1R, 2S, 5R)-2-イソプロピル-5-メチルシクロヘキサン-1-オール 備考: 	魚類	使用可 15.6mg/L	使用可 basesurface narcotics 24.1 mg/L	使用可 Neutral Organics 7.38 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 18.5 mg/L Neutral Organics 10.4 mg/L	
		甲殻類	使用可 26.6mg/L	使用不可 basesurface narcotics 11.4 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 4.76 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 12.8 mg/L ※f;使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 4.64 mg/L	
			分子重	156.27	logP(KowWin)	3.381 ※2	
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	2.52E+0 ※3	
			[予測値]	434.5 ※1	LUMO(eV)	3.28E+0~3.46E+0 ※4	
					ODDI	※5	
					Qc	※6	
28	CAS番号 75-29-6 2-クロロプロパン 備考: 	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;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 37.0 mg/L	使用可 halides3 18.0 mg/L	
			分子重	78.54	logP(KowWin)	1.995 ※2	
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	1.49E+0 ※3	
			[予測値]	3138 ※1	LUMO(eV)	1.41E+0~1.41E+0 ※4	
					ODDI	※5	
					Qc	※6	

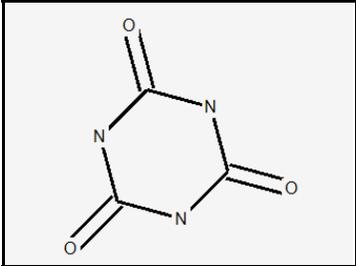
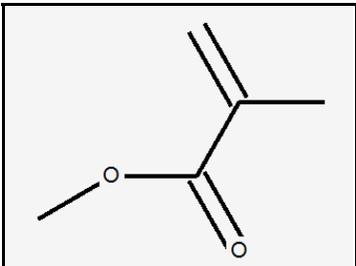
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
29	CAS番号 78-70-6 3,7-ジメチル-1,6-オクタジエン-3-オール 備考: 	魚類	使用可 28.8mg/L	使用可 basesurface narcotics 9.15 mg/L	使用可 OVinyl/Allyl Alcohols 1.86 mg/L Neutral Organic 7.28 mg/L	使用可 conjugated systems2 1.41 mg/L
		甲殻類	使用可 36.7mg/L	使用不可 basesurface narcotics 6.19 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 OVinyl/Allyl Alcohols 0.290 mg/L Neutral Organic 4.70 mg/L	使用可 conjugated systems2 3.07 mg/L
			分子量 154.25	logP(KowWin) 3.381 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 683.7 ※1	logBCFmaxtox 2.52E+0 ※3		
				LUMO(eV) 1.01E+0~1.22E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
30	CAS番号 8000-41-7 テルピネオール 備考: 	魚類	使用可 70mg/L	使用可 basesurface narcotics 10.4 mg/L	使用可 Neutral Organics 8.07 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 20.1 mg/L ※f;使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 11.3 mg/L
		甲殻類	使用可 73mg/L	使用不可 basesurface narcotics 7.06 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 5.18 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 13.6 mg/L ※f;使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 4.93 mg/L
			分子量 154.25	logP(KowWin) 3.332 ※2		
			対水溶解(mg/L) [予測値] 371.7 ※1	logBCFmaxtox 2.49E+0 ※3		
				LUMO(eV) 1.11E+0~1.29E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

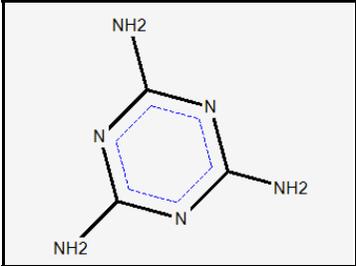
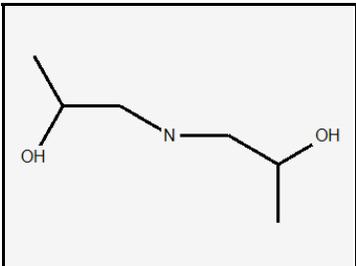
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
31	CAS番号 139-33-3 エチレンジアミン四酢酸二ナトリウム 備考: アミン類 審査対象物質はNa塩だが 酸に代替し予測 	魚類	使用可 320mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9720000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 3960000 mg/L Neutral Organic 4.37e+7 mg/L	使用不可 Unclassified 1980000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 140mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5.83e+7 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 239000 mg/L Neutral Organic 1.45e+7 mg/L	使用不可 Unclassified 78700 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
32	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 292 mg/L Neutral Organic 8110 mg/L	使用不可 esters aliphatic 591 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 1000mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7800 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 759 mg/L Neutral Organic 3800 mg/L	使用不可 esters aliphatic 806 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
35	CAS番号 78-51-3 リン酸トリー-n-ブトキシエチル	魚類	使用可 21mg/L	使用不可 Reactive unspecified 35.5 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 14.0 mg/L ○ Esters (phosphate) 3.88 mg/L Neutral Organic 41.8 mg/L	使用可 esters phosphate 4.64 mg/L
			備考: 	使用可 33mg/L	使用不可 Reactive unspecified 30.2 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 26.1 mg/L ○ Esters (phosphate) 0.00700 mg/L Neutral Organic 26.0 mg/L
	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				
36	CAS番号 104-76-7 2-エチルヘキサン-1-オール	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
			備考: 	使用可 39mg/L	使用可 basesurface narcotics 39.5 mg/L	使用可 Neutral Organics 14.3 mg/L
	分子量 130.23 対水溶解(mg/L) [予測値] 1379 ※1	logP(KowWin) 2.732 ※2 logBCFmaxtox 2.04E+0 ※3 LUMO(eV) 3.37E+0~3.5E+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
39	CAS番号 5333-42-6 2-オクタン-1-イルドデカン-1-オール 備考: <div style="border: 1px solid black; width: 100px; height: 100px; display: flex; align-items: center; justify-content: center;">  </div>	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 basesurface narcotics 4.20 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.000275 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.00119 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.000821 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 basesurface narcotics 1.37 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.000288 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.0112 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.00318 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
分子重 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						
40	CAS番号 108-31-6 無水マレイン酸 備考: 旧指定または旧2監通し番号:1053 官報公示整理番号:2-1101 <div style="border: 1px solid black; width: 100px; height: 100px; display: flex; align-items: center; justify-content: center;">  </div>	魚類	使用可 75mg/L	使用不可 Reactive unspecified 52.3 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 177 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 acrylates 1.35 mg/L ※F:使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 97.2 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 acrylates 2.84 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
分子重 98.06 logP(KowWin) 1.619 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.21E+0 ※3 [予測値] 4912 ※1 LUMO(eV) -1.62E+0~-1.62E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

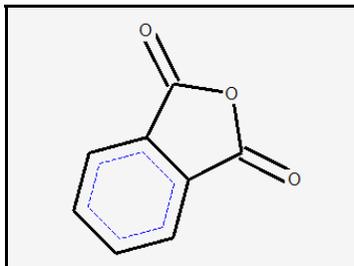
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
41	CAS番号 100-51-6 ベンジルアルコール	魚類	使用可 460mg/L	使用可 basesurface narcotics 350 mg/L	使用可 ○Benzyl Alcohols 214 mg/L Neutral Organic 601 mg/L	使用可 ○Alcohols aliphatic 1190 mg/L Neutral Organics 609 mg/L
			備考: 官報公示整理番号:3-1011	甲殻類	使用可 55mg/L	使用不可 basesurface narcotics 515 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)
	 分子量 108.14 logP(KowWin) 1.076 ※2 対水溶解(mg/L) 41050 ※1 logBCFmaxtox 8.02E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) 2.51E-1~3.16E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
42	CAS番号 461-58-5 ジシアンジアミド(別名:ジアノグアニジン)	魚類	使用可 > 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 20500 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 2230 mg/L Neutral Organic 58000 mg/L	使用不可 nitriles aliphatic 13700 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造 適用範囲外) Neutral Organics 42100 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
			備考: 官報公示整理番号:2-1694	甲殻類	使用可 > 1000mg/L	使用不可 Reactive unspecified 59600 mg/L 使用不能(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) 1000000 ※1 logBCFmaxtox -9.37E-1 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.33E-1~1.33E-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
43	CAS番号 108-80-5 イソシアヌル酸(別名:イソシアヌール酸) 備考: 官報公示整理番号:5-1037 	魚類	使用可 > 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 64.6 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OTriazines, Aromatic 72.0 mg/L Neutral Organic 117 mg/L	使用不可 Unclassified 39.0 mg/L 使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OTriazines, Aromatic 34.7 mg/L Neutral Organic 66.1 mg/L	使用不可 Unclassified 12.7 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
44	CAS番号 80-62-6 メタクリル酸メチル 備考: 旧指定または旧2監通し番号:1048官報公示整理番号:2-1036 	魚類	使用可 130mg/L	使用不可 Reactive unspecified 204 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OMethacrylates 59.1 mg/L Neutral Organic 368 mg/L	使用不可 methacrylates 25.5 mg/L ※f:使用留意(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OMethacrylates 45.0 mg/L Neutral Organic 196 mg/L	使用可 methacrylates 68.7 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 108-78-1 メラミン 備考: 官報公示整理番号:5-1024 	魚類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 7140 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Anilines (amino-meta) 2680 mg/L ○ Melamines 391 mg/L Neutral Organic 14300 mg/L	使用不可 amines aromatic or phenols3 17.8 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			> 3000mg/L			
45	分子量 126.12 logP(KowWin) -0.382 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -2.85E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 5.56E-1~5.56E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 15100 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (amino-meta) 6.23 mg/L Melamines 144 mg/L Neutral Organic 6500 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols5 50.2 mg/L
			200mg/L			
46	CAS番号 110-97-4 ジイソプロパノールアミン 備考: 官報公示整理番号:2-309 アミン類 	魚類	使用可	使用可 narcotic amines 2670 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 1990 mg/L Neutral Organic 42100 mg/L	使用可 secondary or tertiary amines 2520 mg/L
			1466mg/L			
46	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	甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 82400 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 170 mg/L Neutral Organic 18300 mg/L	使用可 secondary or tertiary amines 110 mg/L ※f;使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
			277.7mg/L			

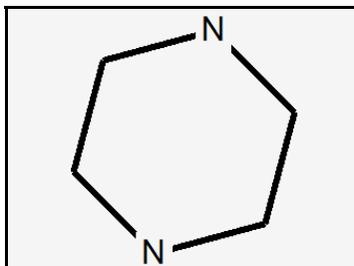
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
47	CAS番号 85-44-9 無水フタル酸	魚類	使用可 > 99mg/L	使用不可 Reactive unspecified 36.4 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 106 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 esters aromatic 18.5 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
			甲殻類	使用可 71mg/L	使用不可 Reactive unspecified 52.7 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 60.3 mg/L ※N:構造適用範囲外
48	CAS番号 110-85-0 ピペラジン	魚類	使用可 > 100mg/L	使用可 narcotic amines 1530 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 1140 mg/L Neutral Organic 23100 mg/L	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 98.3 mg/L Neutral Organic 10100 mg/L

備考:
旧指定または旧2監通し番号:1081官報公示整理番号:3-1344

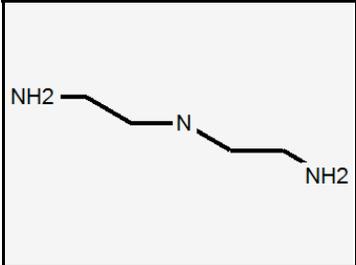
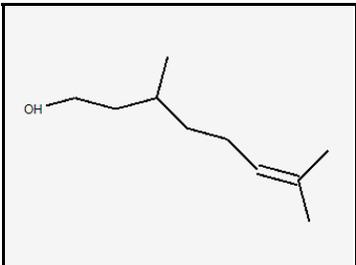


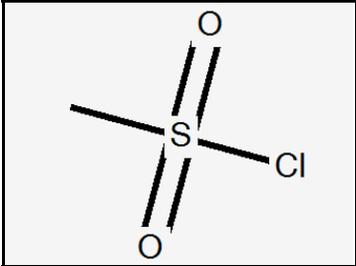
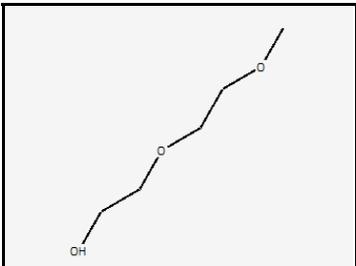
分子量 148.12 logP(KowWin) 2.069 ※2
対水溶解(mg/L) 3326 ※1 logBCFmaxtox 1.54E+0 ※3
[予測値] LUMO(eV) -1.46E+0~-1.46E+0 ※4
ODDI ※5
Qc ※6

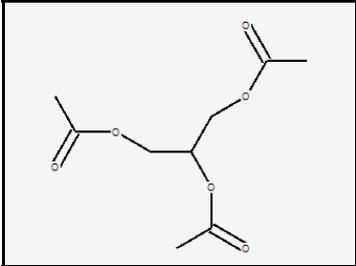
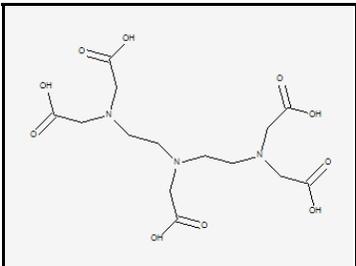
備考:
旧指定または旧2監通し番号:438官報公示整理番号:5-953
アミン類



分子量 86.14 logP(KowWin) -0.799 ※2
対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logBCFmaxtox -5.96E-1 ※3
[予測値] LUMO(eV) ※4
ODDI ※5
Qc ※6

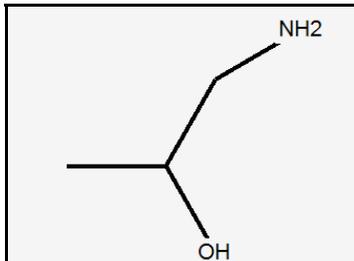
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
49	CAS番号 111-40-0 ジエチレントリアミン(別名 N-(2-アミノエチル)-1,2-エタンジアミン) 備考: 旧指定または旧2監通し番号:382官報公示整理番号:2-159 アミン類 	魚類	使用可 322mg/L	使用可 narcotic amines 13900 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 10300 mg/L Neutral Organic 436000 mg/L	使用不可 primary amines aliphatic 8160 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 16mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1000000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 758 mg/L Neutral Organic 169000 mg/L	使用不可 primary amines aliphatic 1680 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
50	CAS番号 106-22-9 3,7-ジメチルオクタ-6-エン-1-オール 備考: 	魚類	信頼性あるデータなし	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;使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 7.45 mg/L
		甲殻類	使用可 17.48mg/L	使用不可 basesurface narcotics 4.37 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3.38 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 9.92 mg/L ※f;使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 3.57 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
51	CAS番号 124-63-0 メタンスルホニルクロリド	魚類	使用可 11mg/L	使用不可 Reactive unspecified 85.7 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAcid Halides 16.1 mg/L Neutral Organic 423 mg/L	使用不可 halides1 2.57 mg/L ※F;使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAcid Halides 201 mg/L Neutral Organic 225 mg/L
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						
52	CAS番号 111-77-3 2-(2-メトキシエトキシ)エタノール	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;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 52100 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	使用可 > 930mg/L	使用不可 basesurface narcotics 127000 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 30100 mg/L
備考:						
分子量 120.15 logP(KowWin) -1.181 ※2 対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logBCFmaxtox -8.81E-1 ※3 [予測値] 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
53	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 OEsters 264 mg/L Neutral Organic 5290 mg/L	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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEsters 653 mg/L Neutral Organic 2580 mg/L	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					
54	CAS番号 140-01-2 ペンタナトリウム=2, 2', 2'', 2''' - [[(カルボキシ ラトメチル)イミノ]ビス(エチレンニトリロ)]テトラアセ タート 備考: アミン類 審査対象物質はNa塩だが 酸に代替し予測 	魚類	使用可 1115mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.04e+7 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines-acid 2.60e+7 mg/L Neutral Organic 5.15e+8 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 4570000 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
		甲殻類	使用可 245mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7.40e+8 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines-acid 1390000 mg/L Neutral Organic 1.54e+8 mg/L	使用不可 secondary or tertiary amines 1120 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
	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					

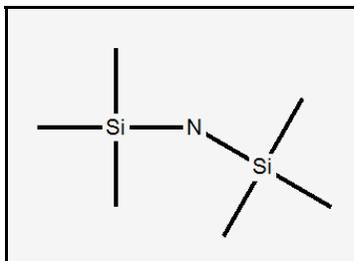
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
55	CAS番号 78-96-6 1-アミノ-2-プロパノール	魚類	使用可 2520mg/L	使用可 narcotic amines 2430 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 1810 mg/L Neutral Organic 45600 mg/L	使用可 primary amines aliphatic 1680 mg/L
			甲殻類	使用可 108.82mg/L	使用不可 Reactive unspecified 104000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 149 mg/L Neutral Organic 19300 mg/L
56	CAS番号 999-97-3 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)	魚類	使用可 88mg/L	使用不可 Reactive unspecified 56.8 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 37.0 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 Unclassified 15.5 mg/L 使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics 22.2 mg/L ※N:構造適用範囲外

備考:
アミン類

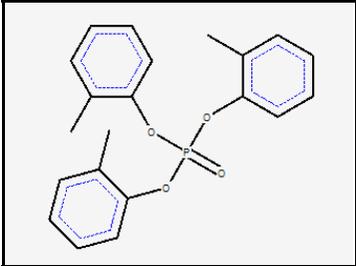
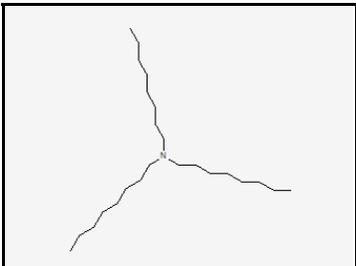


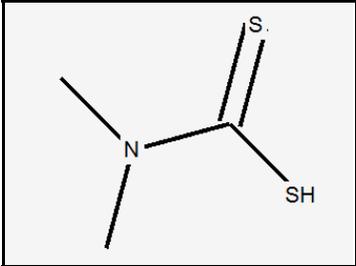
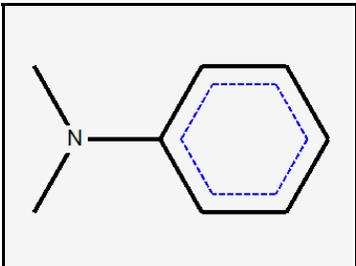
分子量 75.11 logP(KowWin) -1.195 ※2
対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -8.91E-1 ※3
[予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) ※4
ODDI ※5
Qc ※6

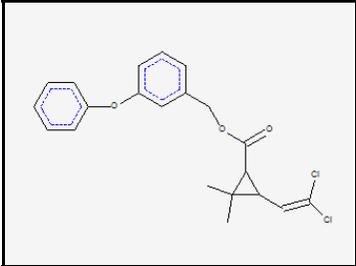
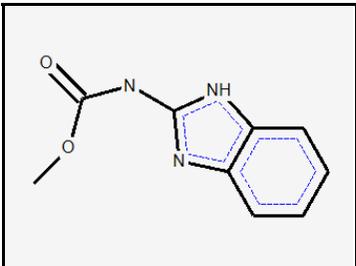
備考:
官報公示整理番号:2-2044

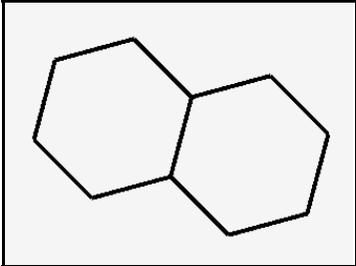
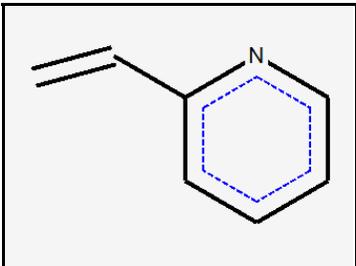


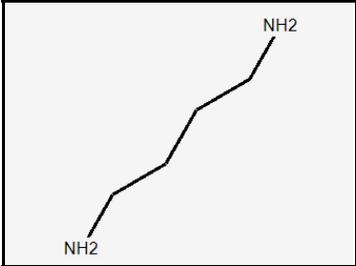
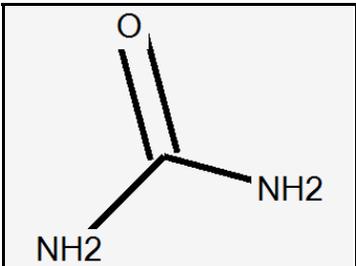
分子量 161.4 logP(KowWin) 2.617 ※2
対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.95E+0 ※3
[予測値] 392.3 ※1 LUMO(eV) 1.84E+0~1.86E+0 ※4
ODDI ※5
Qc ※6

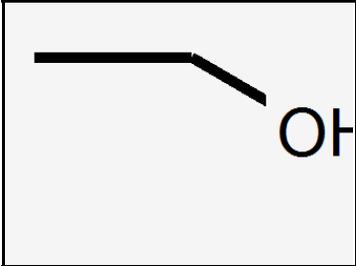
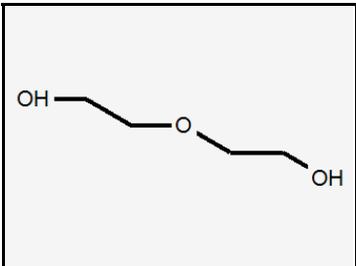
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
57	CAS番号 りん酸トリトリル 備考: 旧指定または旧2監通し番号:1086旧3監通し番号:276 	魚類	使用可 0.84mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0933 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters 0.143 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Esters (phosphate) 0.241 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.0380 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 phosphates 0.0693 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 0.0819 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.25mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0370 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters 0.187 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Esters (phosphate) 0.000327 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.0320 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 phosphates 0.337 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 0.124 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
59	CAS番号 トリオクチルアミン 備考: 旧3監通し番号:165 アミン類 	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 narcotic amines 21.1 mg/L	使用不可 Aliphatic Amines 0.000221 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.00000917 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 secondary or tertiary amines 0.000114 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.026mg/L	使用不可 Reactive unspecified 58.0 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Aliphatic Amines 0.0000697 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.0000113 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 secondary or tertiary amines 9.37 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)

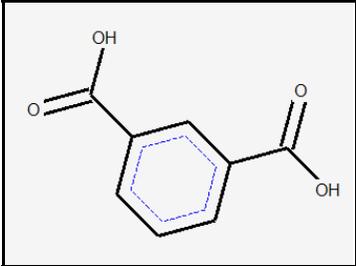
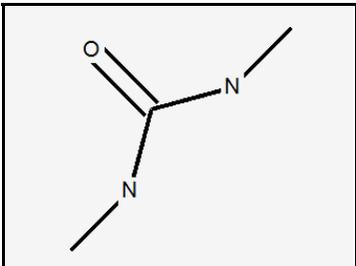
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
60	CAS番号 ナトリウム=N, N-ジメチルジチオカルバマート 備考: 旧3監通し番号:172 審査対象物質はNa塩であるが酸に代替し予測 	魚類	使用可 2.6mg/L	使用不可 Reactive unspecified 454 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Thiocarbamate,Di(free acid) 2.95 mg/L Neutral Organic 1490 mg/L	使用不可 barbitals or thiols other 3550 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.67mg/L	使用不可 Reactive unspecified 924 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Thiocarbamate,Di(free acid) 0.510 mg/L Neutral Organic 750 mg/L	QSARモデルなし
61	CAS番号 N, N-ジメチルアニリン 備考: 旧3監通し番号:187 アミン類 	魚類	使用可 53.7mg/L	使用可 basesurface narcotics 54.5 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 5mg/L	使用不可 basesurface narcotics 57.0 mg/L ※D;使用不能(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;使用不能(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
62	62 CAS番号 ペルメリン(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: 旧3監通し番号:40  分子重量 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	魚類	使用可 0.007mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.171 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 0.0350 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Vinyl/Allyl Halides 0.000882 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) ○ Pyrethroids 0.000354 mg/L Neutral Organic 0.00400 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	QSARモデルなし
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 0.0712 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 0.0410 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Vinyl/Allyl Halides 0.00103 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) ○ Pyrethroids 0.000220 mg/L Neutral Organic 0.00400 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)	QSARモデルなし
63	63 CAS番号 カルベンダジム(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: 旧3監通し番号:247  分子重量 191.19 logP(KowWin) 1.553 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.16E+0 ※3 [予測値] 2441 ※1 LUMO(eV) -5.38E-1~-1.21E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.41mg/L	使用不可 Reactive unspecified 182 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Imidazoles 15.3 mg/L Carbamate Esters 56.4 mg/L Neutral Organic 396 mg/L	carbamates 2.43 mg/L ※F:使用不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 0.35mg/L	使用不可 Reactive unspecified 264 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Imidazoles 3.49 mg/L Carbamate Esters 48.6 mg/L Neutral Organic 216 mg/L	carbamates 0.167 mg/L ※F:使用不能(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
65	CAS番号 ビシクロ[4.4.0]デカン 備考: 旧3監通し番号:237 	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;使用不能(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
66	CAS番号 2-ビニルピリジン 備考: 旧指定または旧2監通し番号:435旧3監通し番号:128 	魚類	使用可 6.5mg/L	使用不可 Reactive unspecified 84.4 mg/L 使用不能(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 使用不能(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

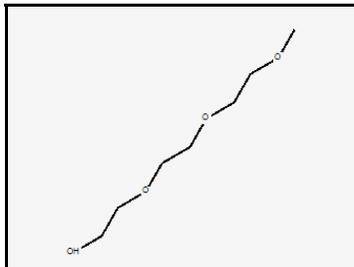
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
69	CAS番号 110-60-1 テトラメチレンジアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 730mg/L	使用可 narcotic amines 1220 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 914 mg/L Neutral Organic 16900 mg/L	使用可 primary amines aliphatic 930 mg/L
		甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 38000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAliphatic Amines 80.1 mg/L Neutral Organic 7510 mg/L	使用可 primary amines aliphatic 138 mg/L
	分子量 88.15 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -0.636 ※2 logBCFmaxtox -4.75E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
70	CAS番号 57-13-6 尿素 備考: 官報公示整理番号:2-1732 	魚類	使用可 17500mg/L	使用可 basesurface narcotics 47200 mg/L	使用不可 Neutral Organics 76900 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 Unclassified 7680 mg/L 使用不能(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:使用不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 31500 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用不可 Unclassified 702 mg/L 使用不能(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
71	CAS番号 64-17-5 エタノール 備考: 官報公示整理番号:2-202 	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:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 282 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
	分子量 46.07 対水溶解(mg/L) [予測値] 792100 ※1 logP(KowWin) -0.141 ※2 logBCFmaxtox -1.05E-1 ※3 LUMO(eV) 3.57E+0~3.57E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
72	CAS番号 111-46-6 ジエチレングリコール 備考: 官報公示整理番号:2-415 	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:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 80900 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 10000mg/L	使用不可 basesurface narcotics 218000 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 47300 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 10800 mg/L ※P, ※f:使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 4880 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
	分子量 106.12 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -1.474 ※2 logBCFmaxtox -1.1E+0 ※3 LUMO(eV) 2.39E+0~2.74E+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
73	CAS番号 121-91-5 イソフタル酸 備考: 官報公示整理番号:3-1332 	魚類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 84.8 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 2260 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 393 mg/L
		甲殻類	> 952mg/L	使用不可 Reactive unspecified 127 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 1260 mg/L ※N:構造適用範囲外	使用可 acids 87.8 mg/L
74	CAS番号 96-31-1 1,3-ジメチル尿素 備考: 官報公示整理番号:2-1734 	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 basesurface narcotics 11700 mg/L	使用可 ○Substituted Ureas 3620 mg/L Neutral Organic 16400 mg/L	使用不可 Unclassified 2260 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	> 500mg/L	使用不可 basesurface narcotics 22900 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Substituted Ureas 3360 mg/L Neutral Organic 7320 mg/L	使用不可 Unclassified 289 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)

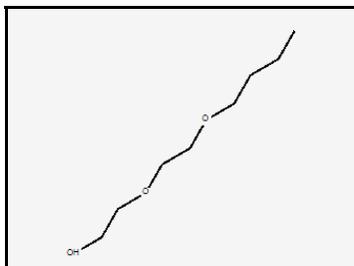
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
75	CAS番号 112-35-6 トリエチレングリコールモノメチルエーテル	魚類	使用可 > 10000mg/L	使用可 basesurface narcotics 130000 mg/L	使用可 Neutral Organics 171000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 260000 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外,麻酔作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 121000 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	使用可 > 500mg/L	使用不可 basesurface narcotics 296000 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 70600 mg/L
76	CAS番号 112-34-5 2-(2-ブトキシエトキシ)エタノール	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	使用可 2850mg/L	使用不可 basesurface narcotics 7050 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2210 mg/L

備考:
官報公示整理番号:2-442

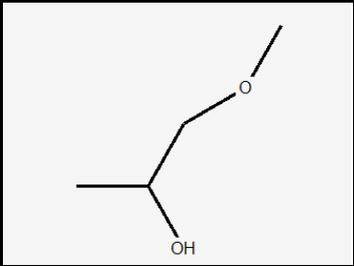
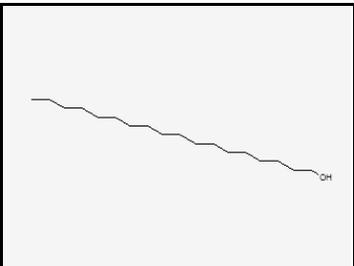


分子量	164.2	logP(KowWin)	-1.456 ※2
対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	-1.09E+0 ※3
[予測値]	1000000 ※1	LUMO(eV)	2.04E+0~2.68E+0 ※4
		ODDI	※5
		Qc	※6

備考:

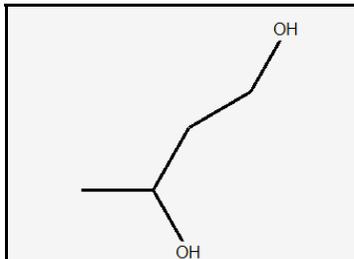


分子量	162.23	logP(KowWin)	0.292 ※2
対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	2.18E-1 ※3
[予測値]	71920 ※1	LUMO(eV)	2.23E+0~2.73E+0 ※4
		ODDI	※5
		Qc	※6

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
77	CAS番号 107-98-2 1-メトキシ-2-ヒドロキシプロパン	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:使用留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 10300 mg/L
			甲殻類	使用可 23300mg/L	使用不可 basesurface narcotics 24400 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 5740 mg/L
	備考: 					
	分子量 90.12 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1					
	logP(KowWin) -0.489 ※2 logBCFmaxtox -3.65E-1 ※3 LUMO(eV) 2.76E+0~3.17E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
78	CAS番号 112-92-5 オクタデカン-1-オール	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:使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.00643 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.00428 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 basesurface narcotics 0.203 mg/L ※D:使用不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.00157 mg/L ※P:使用不能(logP適用範囲外)
	備考: 白通し番号:3967 					
	分子量 270.5 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.0151 ※1					
	logP(KowWin) 7.716 ※2 logBCFmaxtox 4.11E+0 ※3 LUMO(eV) 3.37E+0~3.52E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

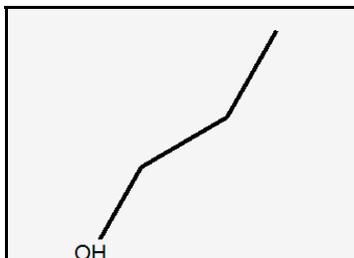
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
79	CAS番号 107-88-0 1,3-ブタンジオール	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 basesurface narcotics 13000 mg/L	使用可 Neutral Organics 8450 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 14500 mg/L Neutral Organics 7050 mg/L
			甲殻類	信頼性あるデータなし	使用不可 basesurface narcotics 17800 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3880 mg/L
80	CAS番号 71-23-8 1-プロパノール	魚類	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	3025mg/L	使用可 basesurface narcotics 3310 mg/L	使用可 Neutral Organics 730 mg/L

備考:

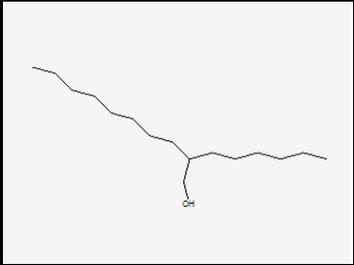
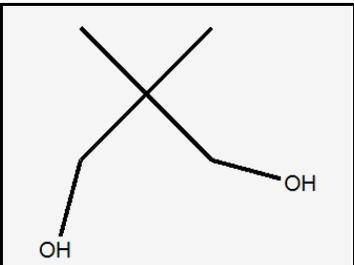


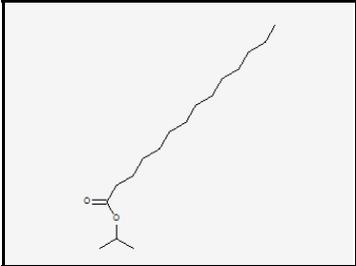
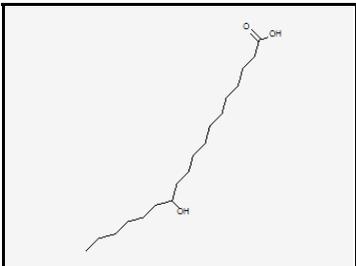
分子量 90.12 logP(KowWin) -0.291 ※2
 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -2.17E-1 ※3
 [予測値] 220400 ※1 LUMO(eV) 3.19E+0~3.34E+0 ※4
 ODDI ※5
 Qc ※6

備考:



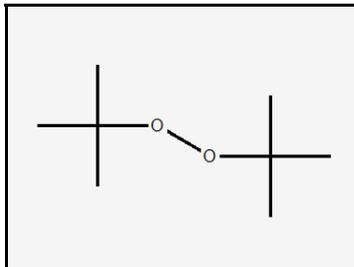
分子量 60.1 logP(KowWin) 0.35 ※2
 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.61E-1 ※3
 [予測値] 271500 ※1 LUMO(eV) 3.6E+0~3.63E+0 ※4
 ODDI ※5
 Qc ※6

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
82	CAS番号 2425-77-6 2-ヘキシルデカン-1-オール	魚類	信頼性あるデータなし	使用可 basesurface narcotics 0.255 mg/L	使用不可 Neutral Organics 0.0130 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.0458 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 0.0292 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	> 0.035mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.0563 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.0110 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
備考: 						
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						
83	CAS番号 126-30-7 2, 2-ジメチル-1, 3-プロパンジオール	魚類	≥ 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	> 1000mg/L	使用不可 basesurface narcotics 7560 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1830 mg/L
備考: 						
分子量 104.15 logP(KowWin) 0.163 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.21E-1 ※3 [予測値] 82530 ※1 LUMO(eV) 3.11E+0~3.39E+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
84	CAS番号 110-27-0 イソプロピル=テトラデカノアート	魚類	使用可	使用可 esters 0.209 mg/L	使用不可 Esters 0.0340 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.00500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 esters aliphatic 0.0160 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			備考: 	> 1000mg/L		
84	分子量 270.46 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.01354 ※1 logP(KowWin) 7.175 ※2 logBCFmaxtox 4.4E+0 ※3 LUMO(eV) 1.22E+0~1.29E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 0.0501 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters 0.0410 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organic 0.00500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 esters aliphatic 0.0164 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			> 0.05mg/L			
85	CAS番号 106-14-9 12-ヒドロキシステアリン酸	魚類	信頼性あるデータなし	使用不可 Reactive unspecified 0.121 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 0.272 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.0936 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 0.0592 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			備考: 			
85	分子量 300.49 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.3315 ※1 logP(KowWin) 6.406 ※2 logBCFmaxtox 4.49E+0 ※3 LUMO(eV) 8.77E-1~1.39E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 0.0395 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 0.232 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)	使用不可 alcohols aliphatic 0.291 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 0.0918 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
			> 100mg/L			

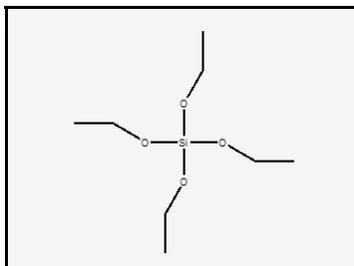
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
86	CAS番号 110-05-4 ジ-tert-ブチルペルオキシド	魚類	使用可 > 160mg/L	使用不可 Reactive unspecified 12.8 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organic 6.01 mg/L	使用不可 Unclassified 3.35 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)
			甲殻類	使用可 > 73.1mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7.02 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OPeroxy Acids 1.07 mg/L Neutral Organic 3.90 mg/L
87	CAS番号 78-10-4 テトラエトキシシラン	魚類	使用可 > 245mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5900 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAlkoxy Silanes 33.0 mg/L Neutral Organic 9930 mg/L	使用不可 Unclassified 1710 mg/L 使用不能(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 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAlkoxy Silanes 19.7 mg/L Neutral Organic 4700 mg/L

備考:



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

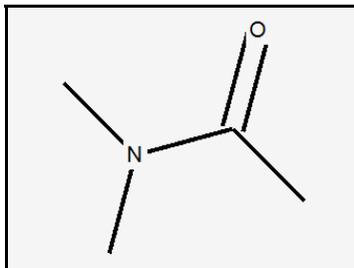
備考:



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

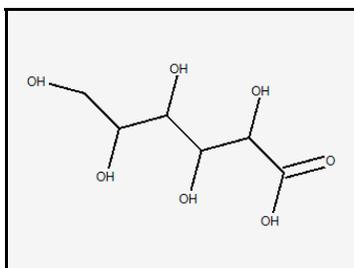
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
88	CAS番号 127-19-5 N, N-ジメチルアセトアミド	魚類	使用可 ≥ 1500mg/L	使用可 basesurface narcotics 6530 mg/L	使用可 ○Amides 1560 mg/L Neutral Organic 12200 mg/L	使用不可 amides or imides 1760 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	使用可 > 1000mg/L	使用不可 basesurface narcotics 13800 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 ○Amides 5390 mg/L Neutral Organic 5510 mg/L
89	CAS番号 527-07-1 ナトリウム=D-グルコナート	魚類	使用可 > 100mg/L	使用不可 Reactive unspecified 148000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 4780000 mg/L ※N;構造適用範囲外	使用不可 conjugated systems1 143 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
			甲殻類	使用可 > 1000mg/L	使用不可 Reactive unspecified 515000 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 1900000 mg/L ※N;構造適用範囲外

備考:
旧指定または旧2監通し番号:1039

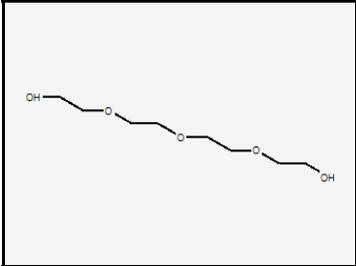
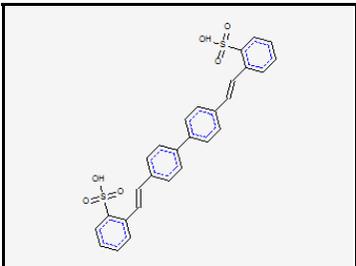


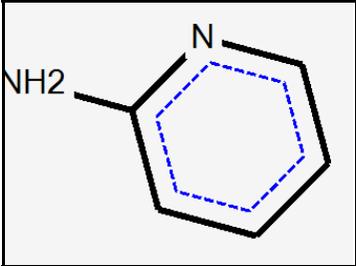
分子量 87.12 logP(KowWin) -0.485 ※2
対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -3.62E-1 ※3
[予測値] 574700 ※1 LUMO(eV) 7.64E-1~1.44E+0 ※4
ODDI ※5
Qc ※6

備考:
審査対象物質はNa塩だが酸に代替し予測



分子量 196.16 logP(KowWin) -1.866 ※2
対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.39E+0 ※3
[予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 1.07E-1~1.05E+0 ※4
ODDI ※5
Qc ※6

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
90	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;使用不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 426000 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 7746mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1140000 mg/L ※D;使用不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 256000 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 44100 mg/L ※P, ※f;使用不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 20500 mg/L ※P;使用不能(logP適用範囲外)
	分子重 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					
92	CAS番号 27344-41-8 ジナトリウム=2, 2'-(ビフェニル-4, 4'-ジイルジエタン-2, 1-ジイル)ビス(ベンゼンスルホナート) 備考: 審査対象物質はNa塩であるが酸に代替し予測 	魚類	使用可 74.8mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.03 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 15.6 mg/L ※N;構造適用範囲外	使用不可 acids 8.61 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 20.9mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.673 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Neutral Organics-acid 11.4 mg/L ※N;構造適用範囲外	使用不可 acids 60.4 mg/L ※P, ※F;使用不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子重 518.6 logP(KowWin) 4.714 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.51E+0 ※3 [予測値] 0.05124 ※1 LUMO(eV) -1.17E+0~-7.28E-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
93	CAS番号 504-29-0 2-アミノピリジン	魚類	使用可 11mg/L	使用不可 Reactive unspecified 875 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 142 mg/L Neutral Organic 1620 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols3 9.13 mg/L
			使用可 35mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1480 mg/L 使用不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.695 mg/L Neutral Organic 802 mg/L	使用可 amines aromatic or phenols5 16.1 mg/L
	備考: 旧指定または旧2監通し番号:436官報公示整理番号:5-724 アミン類					
						
	分子量 94.12 logP(KowWin) 0.53 ※2 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					

予測値の選択

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

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

また、予測結果の信頼性が低い以下のクラスは使用不可とした

- ※TIMES : Reactive Unspecified
- ※KATE : Unclassified

※1 Wskowwin v1.42により算出

※2 KowWin v1.68により算出

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

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

LUMO : the energy of the lowest unoccupied molecular orbital

BCFmaxtox : the maximum bioconcentration factor

ODDI: the donor delocalizability of the aldehyde O-atom

QC : the charge of the C atom from α , β -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>