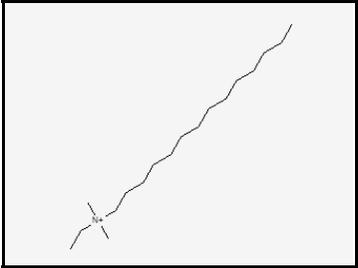
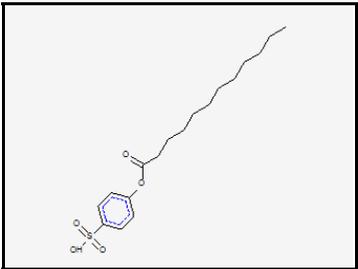
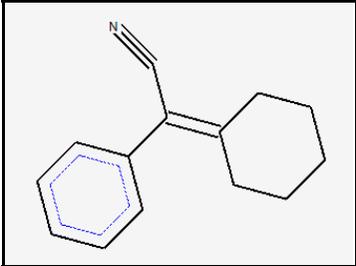
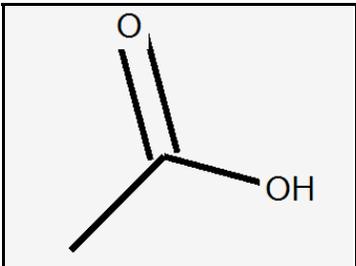
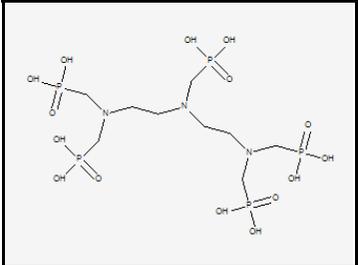
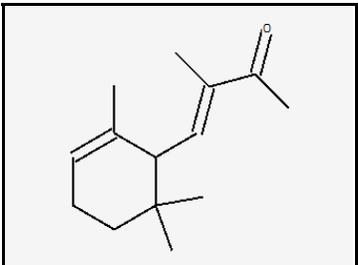
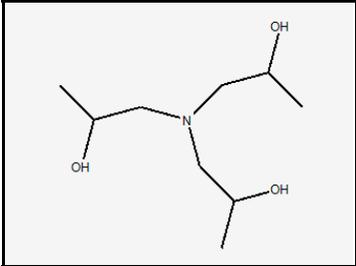
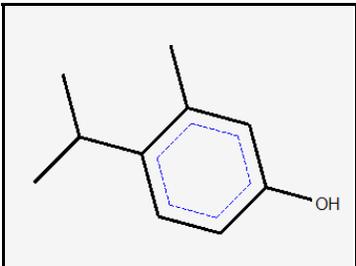
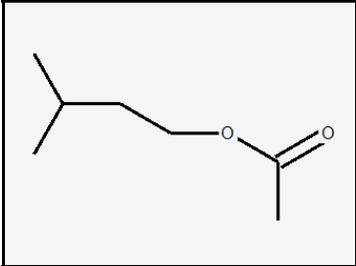
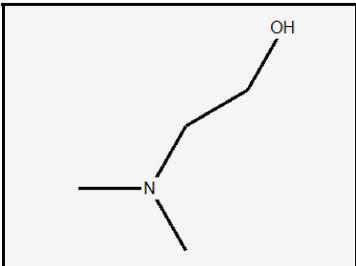


#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
1	CAS番号 19309-23-0 Ethyl ethyldimethyltetradecylammonium sulphate 備考: 	魚類	使用可 3.56 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.178 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 Neutral Organics 0.850 mg/L	QSARモデルなし
		甲殻類	使用可 0.0157 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.180 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 Neutral Organics 0.619 mg/L	QSARモデルなし
分子量 271.53 logP(KowWin) 4.694 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.49E+0 ※3 [予測値] 1.757 ※1 LUMO(eV) -3.88E+0~-3.72E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
2	官報公示整理番号3- CAS番号 4307 ナトリウム=ドデカノイルオキシベンゼンスルホナート 備考: NaをHで置換 	魚類	使用可 > 2 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8.54 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OEsters-acid 78.3 mg/L Baseline Toxicity 18.2 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 59.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 0.56 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8.43 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OEsters-acid 141 mg/L Baseline Toxicity 11.7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 84.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
分子量 356.48 logP(KowWin) 3.343 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.49E+0 ※3 [予測値] 7.909 ※1 LUMO(eV) -1.31E+0~-9.19E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

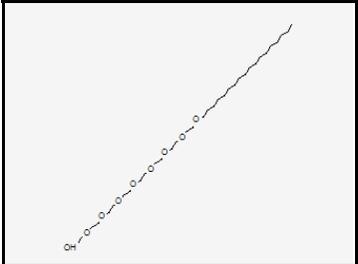
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
3	6旧二監1131旧三監 299 シクロヘキシリデン(フェニル)アセトニトリル CAS番号 備考:  分子量 197.28 logP(KowWin) 4.294 ※2 対水溶解(mg/L) 5.283 ※1 logBCFmaxtox 3.2E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) -2.37E-1~-2.26E-2 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.26 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Vinyl/Allyl Nitriles 0.306 mg/L ----- Baseline Toxicity 1.41 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 1.00 mg/L 判定不能 (信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 2.3 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.800 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Vinyl/Allyl Nitriles 0.340 mg/L ----- Baseline Toxicity 0.990 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 0.790 mg/L 判定不能 (信頼性が低いクラス)
4	酢酸 CAS番号 64-19-7 備考:  分子量 60.05 logP(KowWin) 0.087 ※2 対水溶解(mg/L) 475900 ※1 logBCFmaxtox 6.48E-2 ※3 [予測値] LUMO(eV) 9.73E-1~9.73E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 45 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1680 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 25800 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 2300 mg/L ※P;判定不能 (logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 18.9 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2920 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 12300 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 acids 75.0 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
5	CAS番号 22042-96-2 N-(ホスホノメチル)イミノビス(エチレンニトリロ)テトラキス(メチレン)テトラホスホン酸のナトリウム塩を主成分(70%以上)とする、三塩化リン又備考: 主成分のNaをHで置換、アミン類 	魚類	使用可 216 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5.89e+10 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 5.50e+10 mg/L ----- Baseline Toxicity 1.57e+13 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 9.50e+10 mg/L 判定不能 (信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 242 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.29e+12 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 1.68e+9 mg/L ----- Baseline Toxicity 3.02e+12 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 4.50e+8 mg/L 判定不能 (信頼性が低いクラス)
6	CAS番号 127-51-5 3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl) 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 0.535 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Vinyl/Allyl Ketones 1.43 mg/L ----- Baseline Toxicity 0.476 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 conjugated systems2 0.560 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 2.65 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.280 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Vinyl/Allyl Ketones 0.392 mg/L ----- Baseline Toxicity 0.351 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 conjugated systems2 1.40 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
7	CAS番号 122-20-3 トリス(2-ヒドロキシプロピル)アミン [別名:トリスプロパノールアミン] 備考: アミン類 	魚類	使用可 > 1000 mg/L	使用可 narcotic amines 6470 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 4820 mg/L Baseline Toxicity 123000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 secondary or tertiary amines 6300 mg/L
		甲殻類	使用可 857 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 223000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines 395 mg/L Baseline Toxicity 52000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 secondary or tertiary amines 180 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
	分子量 191.27 logP(KowWin) -1.223 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -9.13E-1 ※3 [予測値] 100000 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
8	CAS番号 3228-02-2 4-イソプロピル-3-メチルフェノール 備考: 	魚類	使用可 7.6 mg/L	使用不可 phenols and anilines 3.11 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Phenols 1.84 mg/L Baseline Toxicity 5.37 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols4 2.30 mg/L
		甲殻類	使用可 5.7 mg/L	使用不可 phenols and anilines 3.40 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Phenols 1.09 mg/L Baseline Toxicity 3.51 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols4 1.60 mg/L
	分子量 150.22 logP(KowWin) 3.516 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.62E+0 ※3 [予測値] 286 ※1 LUMO(eV) 4.49E-1~4.52E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
9	CAS番号 123-92-2 酢酸イソペンチル 備考: 	魚類	使用可 21.5 mg/L	使用不可 esters 22.6 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OEsters 12.2 mg/L Baseline Toxicity 62.0 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 15.0 mg/L
		甲殻類	使用可 42 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 60.1 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 OEsters 24.7 mg/L Baseline Toxicity 36.0 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 19.0 mg/L
10	CAS番号 108-01-0 N, N-ジメチルエタノールアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 81 mg/L	使用可 narcotic amines 1940 mg/L	使用可 OAliphatic Amines 1450 mg/L Baseline Toxicity 31700 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 secondary or tertiary amines 1800 mg/L
		甲殻類	使用可 98.37 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 63500 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 OAliphatic Amines 123 mg/L Baseline Toxicity 13700 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 secondary or tertiary amines 75.0 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)

QSAR予測結果 一般化学物質 2. 今回新たに有害性クラスの付与を行う評価単位: ポリオキシエチレンアルキルエーテル (AE類)

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
11	CAS番号 9005-00-9 Poly(oxy-1,2-ethanediyl), .alpha.-octadecyl-.omega.-hydroxy- 備考: 新たに評価単位を検討する物質のうち、事業者から情報が提供された物質EO8とした 	魚類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 1.01 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.352 mg/L ※logP>5(logP適用範囲外)	使用可 Oalcohols aliphatic 1.10 mg/L ----- Neutral Organics 0.670 mg/L
		甲殻類	0.58 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.339 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.277 mg/L ※logP>5(logP適用範囲外)	使用可 alcohols aliphatic 2.20 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ----- O Neutral Organics 0.730 mg/L
	分子量 622.93 logP(KowWin) 5.521 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.07E+0 ※3 [予測値] 0.007086 ※1 LUMO(eV) 1.72E+0~2.39E+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

•ECOSAR: Baseline toxicity, Baseline toxicity(acid)

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

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

※1 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 v1.111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〉