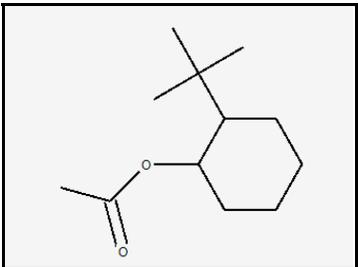
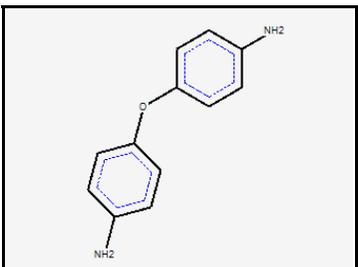
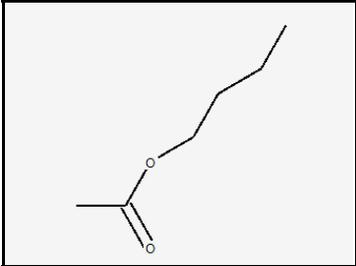
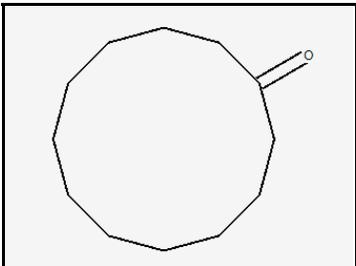
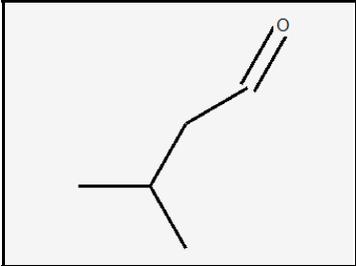
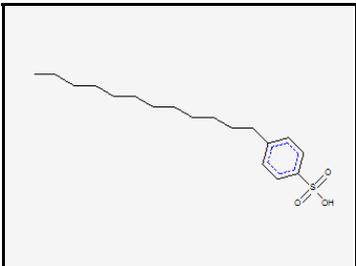
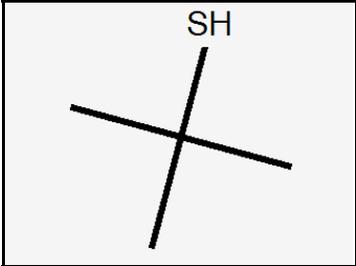
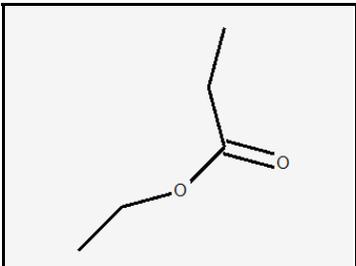
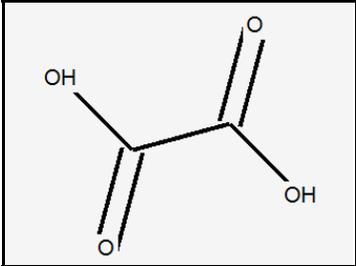
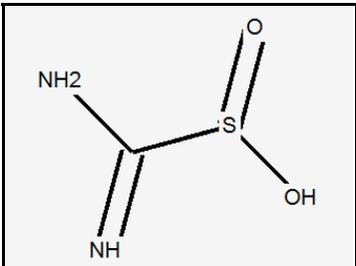


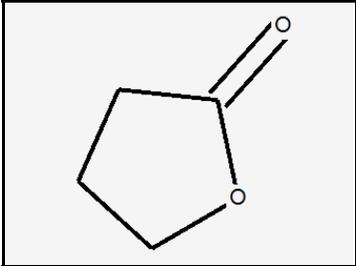
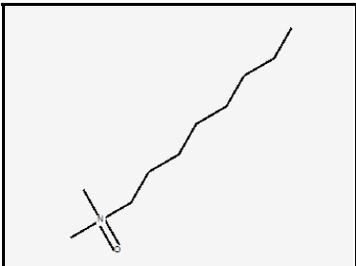
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
1	CAS番号 88-41-5 2-tert-ブチルシクロヘキサン-1-イルニアセテート 備考: 	魚類	使用可 3.4 mg/L	使用不可 esters 1.37 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 1.02 mg/L ----- Baseline Toxicity 1.09 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 esters aliphatic 0.830 mg/L ※P, ※f:判定不能(logP適用範囲外,麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 17 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.881 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 ○Esters 1.64 mg/L ----- Baseline Toxicity 0.772 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 esters aliphatic 0.950 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
	分子量 198.31 logP(KowWin) 4.423 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.3E+0 ※3 [予測値] 10.83 ※1 LUMO(eV) 1.15E+0~1.28E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
2	CAS番号 101-80-4 4, 4' -オキシジアニン 備考: アミン類 	魚類	使用可 >52 mg/L	使用可 phenols and anilines 33.8 mg/L	使用可 ○Anilines (Unhindered) 20.2 mg/L ----- Baseline Toxicity 105 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols3 9.70 mg/L
		甲殻類	使用可 0.663 mg/L	使用不可 phenols and anilines 19.1 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 1.43 mg/L ----- Baseline Toxicity 61.0 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols3 1.80 mg/L
	分子量 200.24 logP(KowWin) 2.215 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.65E+0 ※3 [予測値] 3009 ※1 LUMO(eV) 3.27E-1~4.02E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

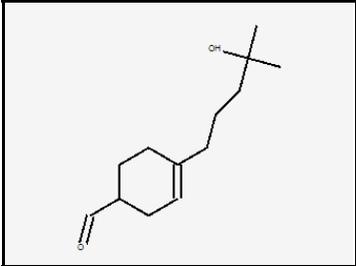
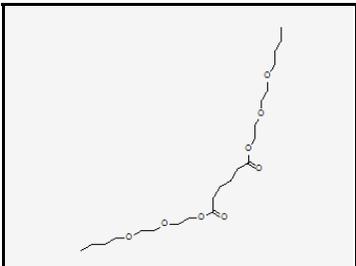
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
5	CAS番号 123-86-4 酢酸ブチル 備考: 	魚類	使用可 18 mg/L	使用可 esters 37.6 mg/L	使用可 OEsters 19.1 mg/L Baseline Toxicity 131 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 26.0 mg/L
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 132 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OEsters 40.3 mg/L Baseline Toxicity 73.4 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 33.0 mg/L
	分子量 116.16 logP(KowWin) 1.846 ※2 対水溶解(mg/L) 3128 ※1 logBCFmaxtox 1.38E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.13E+0~1.17E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
6	CAS番号 830-13-7 シクロドデカノン 備考: 	魚類	実測データなし	使用可 basesurface narcotics 2.81 mg/L	使用可 Neutral Organics 2.06 mg/L	使用可 OKetones 2.90 mg/L Neutral Organics 3.20 mg/L
		甲殻類	使用可 2.5 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1.60 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1.42 mg/L	使用可 Neutral Organics 1.90 mg/L
	分子量 182.31 logP(KowWin) 4.073 ※2 対水溶解(mg/L) 16.91 ※1 logBCFmaxtox 3.04E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 8.85E-1~9.66E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

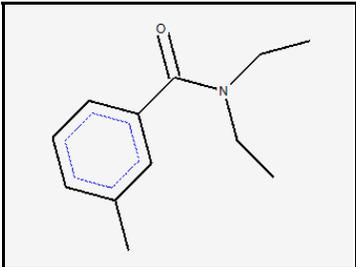
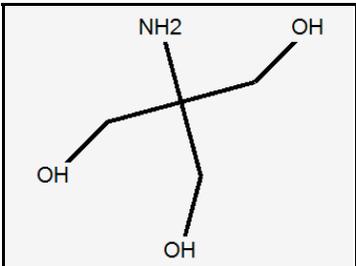
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
7	CAS番号 590-86-3 3-メチルブタナール 備考: 	魚類	使用可 3.25 mg/L	使用可 aldehydes 16.1 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 12.4 mg/L Baseline Toxicity 345 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 aldehydes 12.0 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 177 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 343 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 29.3 mg/L Baseline Toxicity 183 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 aldehydes 12.0 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
8	CAS番号 27176-87-0 ドデシルベンゼンスルホン酸 備考: 	魚類	使用可 4.5 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.645 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 8.47 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 4.80 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 3.4 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.395 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 6.22 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 acids 37.0 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)

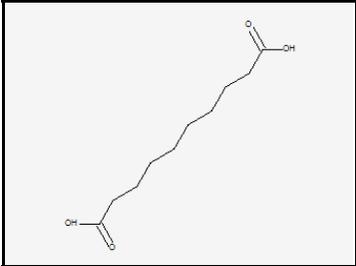
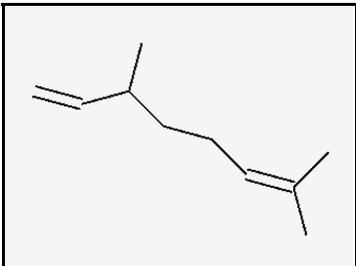
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
9	CAS番号 75-66-1 2-メチルプロパン-2-チオール 備考: 	魚類	使用可 34 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 50.9 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Thiols and Mercaptans 2.66 mg/L Baseline Toxicity 55.6 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 thiols aliphatic(ClogP) 2.70 mg/L
		甲殻類	使用可 6.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 50.5 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Thiols and Mercaptans 0.352 mg/L Baseline Toxicity 32.0 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 thiols aliphatic(ClogP) 0.430 mg/L
10	CAS番号 105-37-3 プロピオン酸エチル 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 esters 70.1 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 ○Esters 32.5 mg/L Baseline Toxicity 318 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 49.0 mg/L
		甲殻類	使用可 70 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 338 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Esters 72.4 mg/L Baseline Toxicity 170 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 63.0 mg/L

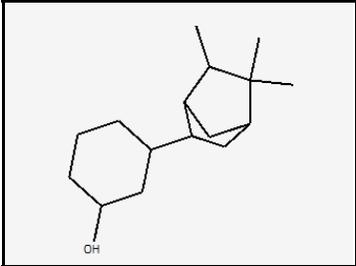
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
11	CAS番号 6153-56-6 シュウ酸二水和物 備考: 無水和物として予測 	魚類	使用可 37.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 52300 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 168000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 conjugated systems1 56.0 mg/L ※P;判定不能 (logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 21 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 176000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 67500 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 conjugated systems1 700 mg/L ※P, ※f判定不能 (logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む)
	分子量 90.04 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -1.737 ※2 logBCFmaxtox -1.3E+0 ※3 LUMO(eV) 5.41E-2~5.77E-2 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
12	CAS番号 1758-73-2 二酸化チオウレア 備考: 	魚類	使用可 416 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1240000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines 70500 mg/L Baseline Toxicity 5960000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 320000 mg/L 判定不能 (信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 48.96 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 6890000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines 4500 mg/L Baseline Toxicity 2060000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 15000 mg/L 判定不能 (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) -3.375 ※2 logBCFmaxtox -2.52E+0 ※3 LUMO(eV) -1.49E-1~5.73E-2 ※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
13	13 CAS番号 96-48-0 γ-ブチロラクトン 備考: 	魚類	使用可 56 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5320 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OEsters 256 mg/L ----- Baseline Toxicity 8330 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 esters aliphatic 540 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 500 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 10100 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OEsters 680 mg/L ----- Baseline Toxicity 3820 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 esters aliphatic 740 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外)
			分子量 86.09	logP(KowWin) -0.306 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox -2.28E-1 ※3		
			[予測値] 447500 ※1	LUMO(eV) 1.11E+0~1.11E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
14	14 CAS番号 2605-78-9 1-Octanamine, N,N-dimethyl-, N-oxide 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 41.0 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OAliphatic Amines 11.4 mg/L ----- Baseline Toxicity 32.9 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 14.0 mg/L 判定不能 (信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 150 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 32.1 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OAliphatic Amines 1.48 mg/L ----- Baseline Toxicity 19.9 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Unclassified 6.10 mg/L 判定不能 (信頼性が低いクラス)
			分子量 173.3	logP(KowWin) 2.709 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 2.02E+0 ※3		
			[予測値] 288.4 ※1	LUMO(eV) 1.31E+0~1.38E+0 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

#	化学物質	対象	毒性値						
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9			
15	CAS番号 31906-04-4 1-ホルミル-4-(4'-ヒドロキシ-4'-メチルペンチル)-3-シクロヘキセン 備考: 	魚類	使用可 11.8 mg/L	使用不可 aldehydes 4.50 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 2.46 mg/L ----- Baseline Toxicity 11.4 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 aldehydes 2.90 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)			
		甲殻類	使用可 15 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.15 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 2.06 mg/L ----- Baseline Toxicity 7.29 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 aldehydes 2.30 mg/L ※P, ※f:判定不能(logP適用範囲外, 麻酔作用を持つ部分構造を含む)			
			分子量	210.32	logP(KowWin)	3.316 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	2.47E+0 ※3			
			[予測値]	394.9 ※1	LUMO(eV)	※4			
					ODDI	2.76E-1 ~ 2.7E-1 ※5			
					Qc	※6			
16	CAS番号 141-17-3 アジピン酸ジ(ブトキシエトキシエチル)ジエステル 備考: 	魚類	使用可 13 mg/L	使用不可 esters 15.3 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Esters 11.0 mg/L ----- Baseline Toxicity 27.7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 11.0 mg/L			
		甲殻類	使用可 420 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 22.7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Esters 20.1 mg/L ----- Baseline Toxicity 17.6 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 esters aliphatic 14.0 mg/L			
			分子量	434.58	logP(KowWin)	3.236 ※2			
			対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	2.41E+0 ※3			
			[予測値]	3.212 ※1	LUMO(eV)	8.3E-1 ~ 1.14E+0 ※4			
					ODDI	※5			
					Qc	※6			

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
23	CAS番号 134-62-3 Benzamide, N,N-diethyl-3-methyl- 備考: 	魚類	使用可 >100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 62.7 mg/L	使用可 ○Amides 37.4 mg/L Baseline Toxicity 92.2 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amides or imides 44.0 mg/L
		甲殻類	使用可 74 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 67.7 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 ○Amides 36.5 mg/L Baseline Toxicity 53.6 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amides or imides 22.0 mg/L
			分子量 191.28	logP(KowWin) 2.258 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 1.68E+0 ※3		
			[予測値] 666 ※1	LUMO(eV) 7.04E-2~1.68E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
24	CAS番号 77-86-1 2-アミノ-2-ヒドロキシメチル-1,3-プロパンジオール 備考: アミン類 	魚類	実測データなし	使用不可 narcotic amines 6840 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 ○Aliphatic Amines 5080 mg/L Baseline Toxicity 157000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 primary amines aliphatic 4400 mg/L
		甲殻類	使用可 > 980 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 333000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines 400 mg/L Baseline Toxicity 64100 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 primary amines aliphatic 810 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外)
			分子量 121.14	logP(KowWin) -1.561 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox -1.16E+0 ※3		
			[予測値] 1000000 ※1	LUMO(eV) ※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
32	CAS番号 111-20-6 1, 8-オクタンジールカルボン酸 [別名:セバシン酸] 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 104 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1120 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 acids 230 mg/L
		甲殻類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 101 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 645 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 acids 86.0 mg/L
33	CAS番号 2436-90-0 2, 6-ジメチル-2, 7-オクタジエン 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 0.538 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.292 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 0.540 mg/L
		甲殻類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.233 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 0.216 mg/L	使用可 Ohydrocabons aliphatic 0.380 mg/L Neutral Organics 0.420 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
37	CAS番号 3407-42-9 3-(5,5,6-トリメチルビシクロ[2.2.1]ヘプタン-2-イル)シクロヘキサノール	魚類	使用可 > 64 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.755 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.139 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)	使用可 Oalcohols aliphatic 0.430 mg/L ----- Neutral Organics 0.260 mg/L
			備考: 	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 0.200 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Neutral Organics 0.109 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 236.4 logP(KowWin) 5.503 ※2 対水溶解(mg/L) 1.817 ※1 logBCFmaxtox 4.06E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 3.26E+0~3.45E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類				

予測値の選択

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

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

また、予測結果の信頼性が低い以下のクラスは使用不可とした

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

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

※1 Wskowwin v1.42により算出

※2 KowWin v1.68により算出

※3~7 TIMES v2.27.15 により算出。魚類エンドポイント: Pimephales Promelas 96h LC50。甲殻類エンドポイント: Daphnia Magna 48h EC50。量子化学計算はコンフォ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。logPI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.logPI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>