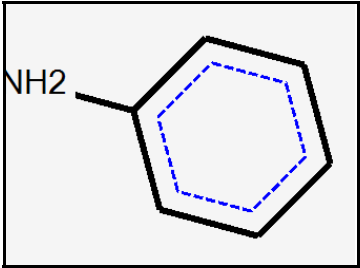
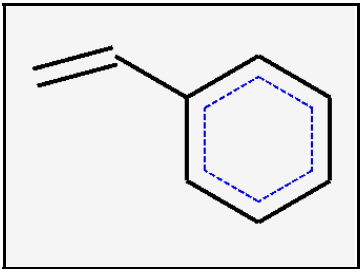
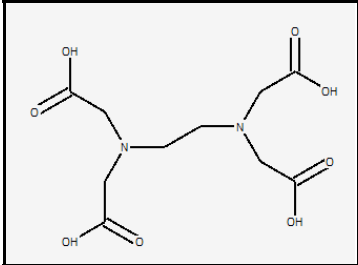
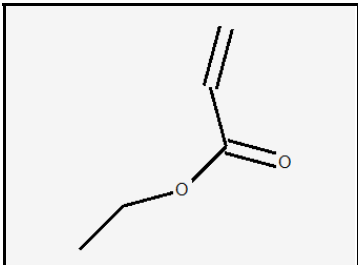
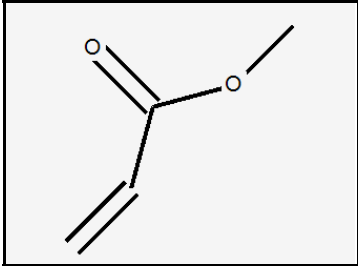
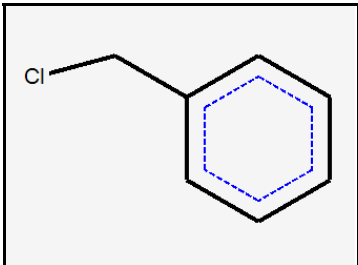
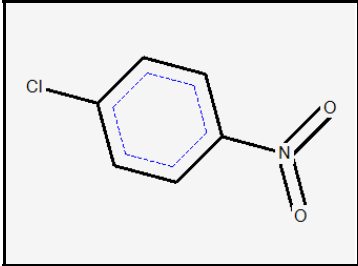
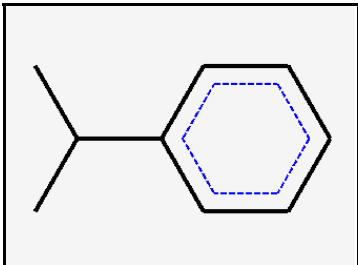


指定済みの優先評価化学物質の生態影響に関する優先度判定案: 1. 今回新たに有害性クラスの付与を行う物質

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
2	片側優先54 CAS番号 62-53-3 アニリン 備考: アミン類 	魚類	使用可 10.6 mg/L	使用可 phenols and anilines 123 mg/L	使用可 ○Anilines (Unhindered) 58.4 mg/L Baseline Toxicity 517 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols5 106 mg/L
		甲殻類	使用可 0.08 mg/L	使用可 phenols and anilines 36.4 mg/L	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.679 mg/L Baseline Toxicity 270 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols1 0.467 mg/L
分子量 93.13 logP(KowWin) 1.076 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 8.03E-1 ※3 [予測値] 20820 ※1 LUMO(eV) 6.39E-1~6.39E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
3	片側優先47 CAS番号 100-42-5 スチレン 備考: 	魚類	使用可 4.02 mg/L	使用可 basesurface narcotics 10.3 mg/L	使用可 Neutral Organics 13.4 mg/L	使用不可 hydrocarbons aromatic 12.9 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 4.7 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 9.31 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 8.29 mg/L	使用不可 hydrocarbons aromatic 4.73 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
分子量 104.15 logP(KowWin) 2.895 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.16E+0 ※3 [予測値] 343.7 ※1 LUMO(eV) 6.68E-2~4.69E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

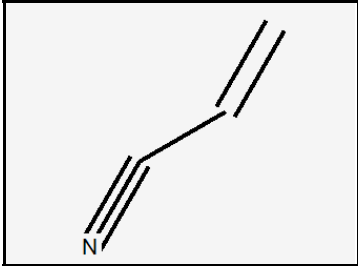
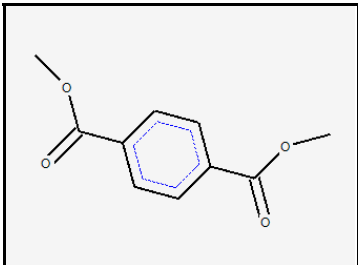
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
4	片側優先36 CAS番号 60-00-4 エチレンジアミン四酢酸 備考: アミン類 	魚類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			> 100 mg/L	Reactive unspecified 9720000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	○Aliphatic Amines-acid 3960000 mg/L Baseline Toxicity 4.37e+7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	Unclassified 1980000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
4	分子量 292.25 logP(KowWin) -3.857 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -2.88E+0 ※3 [予測値] 228200 ※1 LUMO(eV) 2.25E-1~7.62E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			65 mg/L	Reactive unspecified 5.83e+7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	○Aliphatic Amines-acid 239000 mg/L Baseline Toxicity 1.45e+7 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	Unclassified 78700 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
5	片側優先32 CAS番号 140-88-5 アクリル酸エチル 備考: 	魚類	使用可	使用不可	使用可	使用可
			1.16 mg/L	Reactive unspecified 222 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	○Acrylates 2.20 mg/L Baseline Toxicity 414 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	acrylates 1.73 mg/L
5	分子量 100.12 logP(KowWin) 1.219 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 9.09E-1 ※3 [予測値] 8717 ※1 LUMO(eV) -1.57E-2~3.84E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可	使用可	使用可
			4.39 mg/L	Reactive unspecified 326 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	○Acrylates 5.80 mg/L Baseline Toxicity 219 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	acrylates 3.25 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
6	片側優先31 CAS番号 96-33-3 アクリル酸メチル 備考: 	魚類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 471 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Acrylates 2.51 mg/L Baseline Toxicity 982 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acrylates 1.96 mg/L
			1.36 mg/L			
6	分子量 86.09 logP(KowWin) 0.728 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 5.43E-1 ※3 [予測値] 26360 ※1 LUMO(eV) -5.45E-2~5.55E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 802 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Acrylates 7.75 mg/L Baseline Toxicity 496 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acrylates 3.21 mg/L
			2.64 mg/L			
7	片側優先51 CAS番号 100-44-7 ベンジル=クロリド(別名塩化ベンジル) 備考: 	魚類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 15.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Benzyl Halides 0.404 mg/L Baseline Toxicity 20.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 halides1 1.17 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			1.9 mg/L			
7	分子量 126.59 logP(KowWin) 2.794 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.08E+0 ※3 [予測値] 1030 ※1 LUMO(eV) 8.03E-2~8.03E-2 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 14.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Benzyl Halides 5.17 mg/L Baseline Toxicity 12.3 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 halides1 1.30 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			3.2 mg/L			

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
8	片側優先60 CAS番号 100-00-5 p-クロロニトロベンゼン 備考: 	魚類	使用可 6 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 19.7 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 50.5 mg/L	使用可 nitrobenzenes 16.8 mg/L
		甲殻類	使用可 2.7 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 25.1 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 29.9 mg/L	使用可 nitrobenzenes 10.4 mg/L
9	片側優先126 CAS番号 98-82-8 クメン 備考: 	魚類	使用可 4.8 mg/L	使用可 basesurface narcotics 5.15 mg/L	使用可 Neutral Organics 4.93 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 6.63 mg/L
		甲殻類	使用可 2.14 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 3.68 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 3.20 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 2.50 mg/L

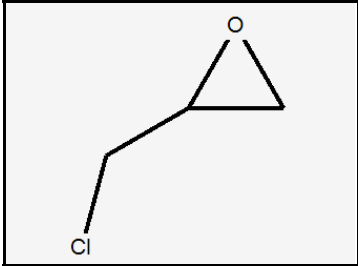
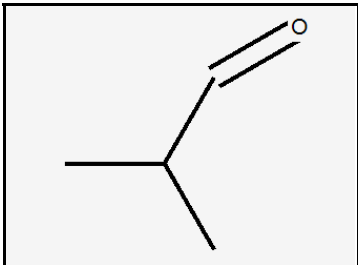
分子量 157.56 logP(KowWin) 2.455 ※2
対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.83E+0 ※3
[予測値] 260.2 ※1 LUMO(eV) -1.34E+0~-9.29E-1 ※4
ODDI ※5
Qc ※6

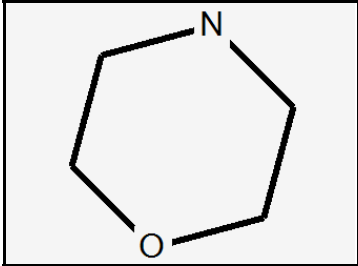
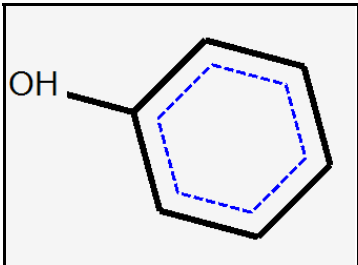
分子量 120.2 logP(KowWin) 3.449 ※2
対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.57E+0 ※3
[予測値] 75.03 ※1 LUMO(eV) 5.43E-1~5.52E-1 ※4
ODDI ※5
Qc ※6

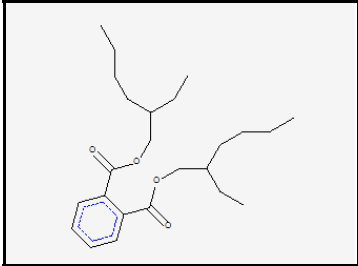
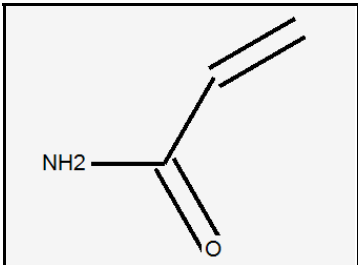
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
10	片側優先39 CAS番号 107-13-1 アクリロニトリル 備考: 	魚類	使用可 5.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 247 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Vinyl/Allyl Nitriles 26.8 mg/L Baseline Toxicity 1770 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems1 3.02 mg/L
		甲殻類	使用可 2.5 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 479 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Vinyl/Allyl Nitriles 1.72 mg/L Baseline Toxicity 851 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems1 7.37 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
11	片側優先67 CAS番号 120-61-6 テレフタル酸ジメチル 備考: 	魚類	使用可 9.6 mg/L	使用可 esters 30.8 mg/L	使用可 ○Esters 40.8 mg/L Baseline Toxicity 320 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aromatic 39.1 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 30.4 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 184 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Esters 88.0 mg/L Baseline Toxicity 176 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aromatic 87.5 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)

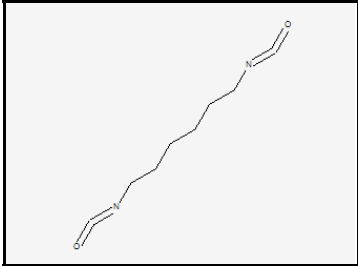
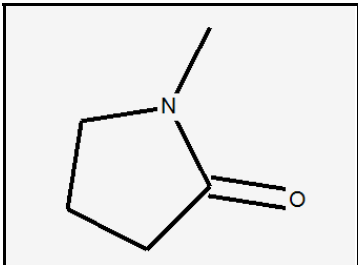
分子量	53.06	logP(KowWin)	0.209 ※2
対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	1.56E-1 ※3
[予測値]	45290 ※1	LUMO(eV)	4.9E-2~4.9E-2 ※4
		ODDI	※5
		Qc	※6

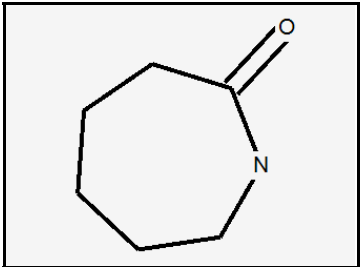
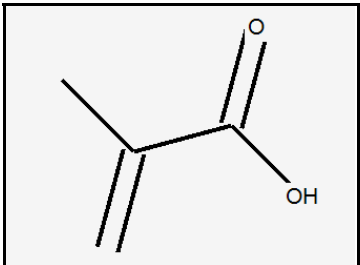
分子量	194.19	logP(KowWin)	1.663 ※2
対水溶解(mg/L)		logBCFmaxtox	1.24E+0 ※3
[予測値]	561.1 ※1	LUMO(eV)	-1.07E+0~-9.08E-1 ※4
		ODDI	※5
		Qc	※6

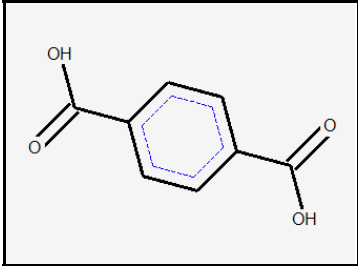
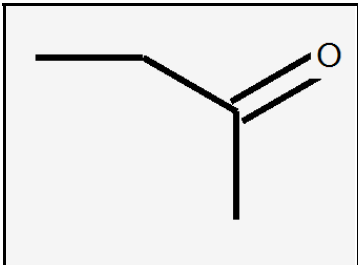
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
12	片側優先22 CAS番号 106-89-8 エピクロロヒドリン 備考: 	魚類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			10.6 mg/L	Reactive unspecified 1000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	OHalo Epoxides 23.6 mg/L Baseline Toxicity 1300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	epoxides(ClogP) 4.41 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
13	片側優先111 CAS番号 78-84-2 イソブチルアルデヒド 備考: 	魚類	使用可	使用不可	使用可	使用可
			23 mg/L	aldehydes 25.7 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	OHalo Epoxides 21.2 mg/L Baseline Toxicity 651 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	epoxides(ClogP) 8.52 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
12	分子量 92.53 対水溶解(mg/L) [予測値] 50630 ※1 logP(KowWin) 0.626 ※2 logBCFmaxtox 4.67E-1 ※3 LUMO(eV) 1.11E+0~1.15E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可	使用可	使用可
			23.9 mg/L	Reactive unspecified 1460 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	OHalo Epoxides 21.2 mg/L Baseline Toxicity 651 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	epoxides(ClogP) 8.52 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
13	分子量 72.11 対水溶解(mg/L) [予測値] 31240 ※1 logP(KowWin) 0.743 ※2 logBCFmaxtox 5.54E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.88E-1~2.86E-1 ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可	使用可	使用可
			277 mg/L	Reactive unspecified 834 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	OHalo Epoxides 21.2 mg/L Baseline Toxicity 403 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	aldehydes 17.4 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)

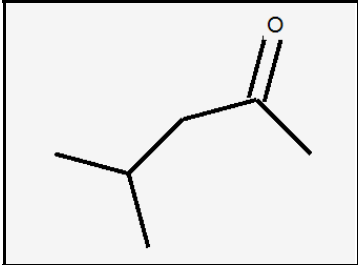
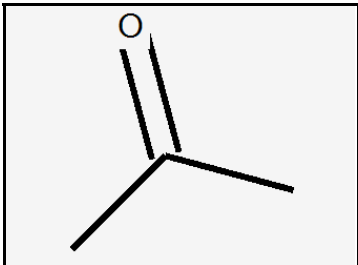
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
14	片側優先81 CAS番号 110-91-8 モルホリン 備考: アミン類 	魚類	使用可 180 mg/L	使用可 narcotic amines 1070 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 804 mg/L Baseline Toxicity 14200 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 993 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		甲殻類	使用可 44.5 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 28000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 71.2 mg/L Baseline Toxicity 6380 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 65.2 mg/L
	分子重量 87.12 logP(KowWin) -0.559 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -4.17E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
15	片側優先62 CAS番号 108-95-2 フェノール 備考: 	魚類	使用可 8.9 mg/L	使用可 phenols and anilines 53.1 mg/L	使用可 ○Phenols 38.4 mg/L Baseline Toxicity 212 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 40.7 mg/L
		甲殻類	使用可 4.2 mg/L	使用可 phenols and anilines 20.5 mg/L	使用可 ○Phenols 9.30 mg/L Baseline Toxicity 115 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols4 9.72 mg/L
	分子重量 94.11 logP(KowWin) 1.513 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.13E+0 ※3 [予測値] 26160 ※1 LUMO(eV) 3.97E-1~3.97E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

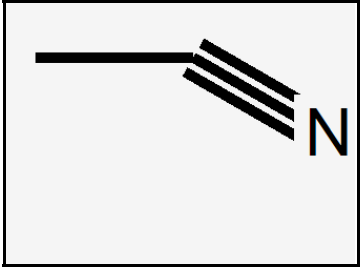
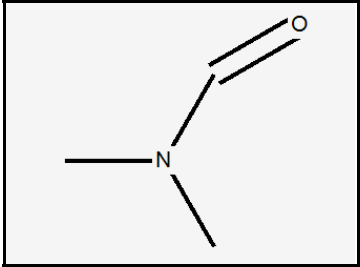
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
16	片側優先66 CAS番号 117-81-7 フタル酸ビス(2-エチルヘキシル) 備考: 	魚類	使用可	使用不可 esters 0.541 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Esters 0.0100 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.000583 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aromatic 0.0278 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
			74.8 mg/L	11 mg/L	Reactive unspecified 0.369 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	Esters 0.0100 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.000597 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
	分子重 390.57 logP(KowWin) 8.392 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 3.65E+0 ※3 [予測値] 0.001132 ※1 LUMO(eV) -8.36E-1~-5.44E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 0.369 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Esters 0.0100 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.000597 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 esters aromatic 0.143 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
17	片側優先34 CAS番号 79-06-1 アクリルアミド 備考: 	魚類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 7580 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Acrylamides 64.9 mg/L Baseline Toxicity 19400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 14.1 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
			100 mg/L	98 mg/L	Reactive unspecified 19300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	○Acrylamides 161 mg/L Baseline Toxicity 8500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
	分子重 71.08 logP(KowWin) -0.807 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -6.02E-1 ※3 [予測値] 504000 ※1 LUMO(eV) 1.66E-1~3.33E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 19300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Acrylamides 161 mg/L Baseline Toxicity 8500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 conjugated systems1 80.5 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
18	片側優先43 CAS番号 822-06-0 ヘキサメチレン=ジイソシアネート 備考: 	魚類	使用可 > 82.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 11.2 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 11.7 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 5.94 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 > 89.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8.74 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 7.39 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 3.03 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
19	片側優先136 CAS番号 872-50-4 N-アルキル(C1, 2)-2-ピロリドン 備考: 	魚類	使用可 832 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 4950 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 OAmides 950 mg/L Baseline Toxicity 6350 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amides or imides 1080 mg/L
		甲殻類	使用可 4987 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 8380 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 OAmides 2760 mg/L Baseline Toxicity 2970 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amides or imides 984 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
			分子重 168.2 logP(KowWin) 3.196 ※2 対水溶解(mg/L) 117 ※1 logBCFmaxtox 2.38E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 4.7E-1~6.06E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6			
			分子重 99.13 logP(KowWin) -0.106 ※2 対水溶解(mg/L) 248300 ※1 logBCFmaxtox -7.93E-2 ※3 [予測値] LUMO(eV) 1.49E+0~1.49E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6			

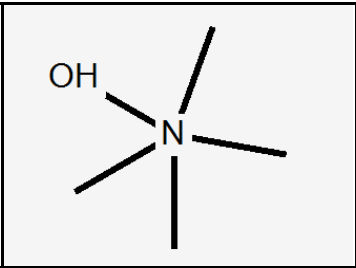
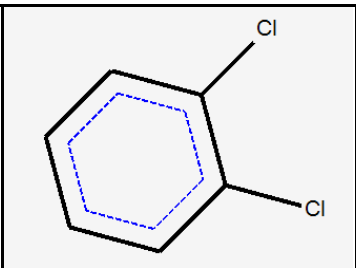
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
20	片側優先82 CAS番号 105-60-2 ε -カプロラクタム 備考: 	魚類	使用可 707.1 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1050 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OAmides 305 mg/L Baseline Toxicity 1470 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amides or imides 351 mg/L
			甲殻類	使用可 820 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 1560 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 OAmides 621 mg/L Baseline Toxicity 738 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
分子量 113.16 logP(KowWin) 0.665 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.96E-1 ※3 [予測値] 28720 ※1 LUMO(eV) 9.1E-1~1.57E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
21	片側優先35 CAS番号 79-41-4 メタクリル酸 備考: 	魚類	使用可 85 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 279 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 5720 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids acrylic 58.8 mg/L
			甲殻類	> 130 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 447 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 2960 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)
分子量 86.09 logP(KowWin) 0.989 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 7.38E-1 ※3 [予測値] 50700 ※1 LUMO(eV) -1.38E-1~7.69E-2 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

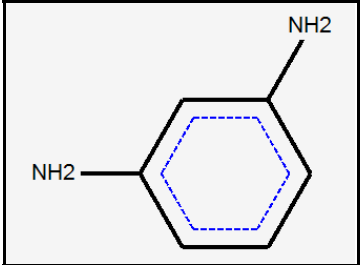
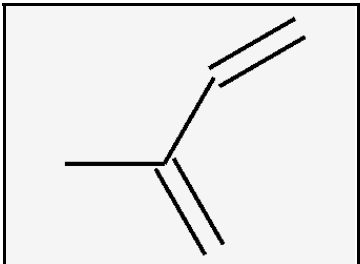
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
22	片側優先68 CAS番号 100-21-0 テレフタル酸 備考: 	魚類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 77.6 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 2260 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 393 mg/L
			> 19 mg/L	> 20.1 mg/L	> 20.1 mg/L	> 20.1 mg/L
23	片側優先115 CAS番号 78-93-3 メチルエチルケトン 備考: 	魚類	使用可	使用可 basesurface narcotics 1410 mg/L	使用可 Neutral Organics 2180 mg/L	使用可 Oketones 1360 mg/L Neutral Organics 1970 mg/L
			2993 mg/L	308 mg/L	308 mg/L	308 mg/L
		甲殻類	使用可	使用不可 Reactive unspecified 120 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1260 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 acids 87.8 mg/L
	分子量 166.13 logP(KowWin) 1.756 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.31E+0 ※3 [予測値] 1256 ※1 LUMO(eV) -1.32E+0~-1.3E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
		甲殻類	使用可	使用不可 basesurface narcotics 2370 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1050 mg/L	使用不可 Neutral Organics 242 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 72.11 logP(KowWin) 0.256 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.91E-1 ※3 [予測値] 76100 ※1 LUMO(eV) 8.72E-1~8.81E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

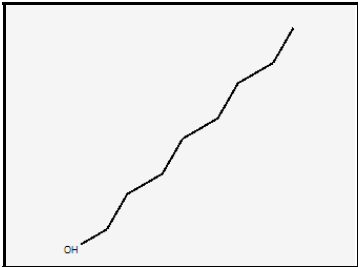
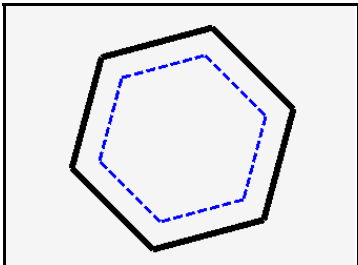
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
24	片側優先116 CAS番号 108-10-1 メチルイソブチルケトン 備考: 	魚類	使用可 525 mg/L	使用可 basesurface narcotics 358 mg/L	使用可 Neutral Organics 463 mg/L	使用可 Oketones 352 mg/L Neutral Organics 475 mg/L
		甲殻類	使用可 > 200 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 464 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 243 mg/L	使用可 Neutral Organics 85.0 mg/L
			分子量 100.16	logP(KowWin) 1.165 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox 8.69E-1 ※3		
			[予測値] 8888 ※1	LUMO(eV) 8.78E-1~9.05E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		
25	片側優先114 CAS番号 67-64-1 アセトン 備考: 	魚類	使用可 5540 mg/L	使用可 basesurface narcotics 2830 mg/L	使用可 Neutral Organics 4850 mg/L	使用可 Oketones 2720 mg/L Neutral Organics 4080 mg/L
		甲殻類	使用可 6098.4 mg/L	使用可 basesurface narcotics 5490 mg/L	使用可 Neutral Organics 2240 mg/L	使用不可 Neutral Organics 410 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
			分子量 58.08	logP(KowWin) -0.235 ※2		
			対水溶解(mg/L)	logBCFmaxtox -1.75E-1 ※3		
			[予測値] 219900 ※1	LUMO(eV) 8.53E-1~8.53E-1 ※4		
				ODDI ※5		
				Qc ※6		

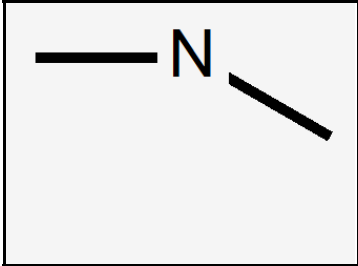
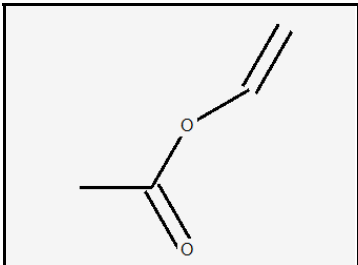
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
26	片側優先38 CAS番号 75-05-8 アセトニトリル 備考: 	魚類	使用可	使用可	使用可	使用可
			> 100 mg/L	basesurface narcotics 2380 mg/L	Neutral Organics 2850 mg/L	Onitriles aliphatic 771 mg/L Neutral Organics 2430 mg/L
	分子重 41.05 logP(KowWin) -0.146 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.09E-1 ※3 [予測値] 136700 ※1 LUMO(eV) 1.66E+0~1.66E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			> 1000 mg/L	basesurface narcotics 3960 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	Neutral Organics 1330 mg/L	Neutral Organics 253 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
27	片側優先27 CAS番号 68-12-2 N,N-ジメチルホルムアミド 備考: 	魚類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			7100 mg/L	Reactive unspecified 4880 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	○Amides 2740 mg/L Baseline Toxicity 25900 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	amides or imides 3060 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
	分子重 73.1 logP(KowWin) -0.934 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -6.97E-1 ※3 [予測値] 977900 ※1 LUMO(eV) 1.49E+0~1.49E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	甲殻類	使用可	使用不可	使用可	使用不可
			> 1000 mg/L	Reactive unspecified 10500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	○Amides 11600 mg/L Baseline Toxicity 11200 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	amides or imides 3470 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)

指定済みの優先評価化学物質の生態影響に関する優先度判定案: 2. 再審議物質

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
1	<p>優先通し番号:17 CAS番号 75-59-2</p> <p>テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド</p> <p>備考:</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p>分子量 91.15 logP(KowWin) -2.474 ※2 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logBCFmaxtox ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6</p>	魚類	実測データなし	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity 781000 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	QSARモデルなし
		甲殻類	使用可 3 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity 294000 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	QSARモデルなし
2	<p>旧3監通し番号:23 優先通し番号:52 CAS番号</p> <p>o-ジクロロベンゼン</p> <p>備考:</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p>分子量 147 logP(KowWin) 3.282 ※2 対水溶解(mg/L) [予測値] 92.03 ※1 logBCFmaxtox 2.45E+0 ※3 LUMO(eV) -1.43E-1~-1.43E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6</p>	魚類	使用可 3.8 mg/L	使用可 basesurface narcotics 6.46 mg/L	使用可 Neutral Organics 8.52 mg/L	使用可 halides3 7.80 mg/L
		甲殻類	使用可 1.4 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 5.39 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 5.45 mg/L	使用可 halides3 2.92 mg/L

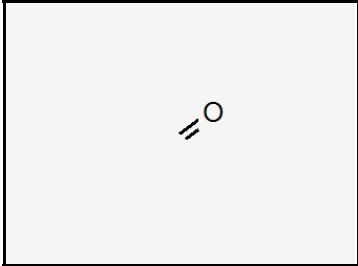
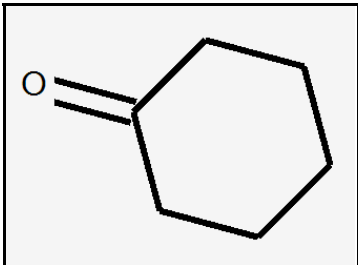
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
3	旧3監通し番号:88 優先通し 番号:55 CAS番号 m-フェニレンジアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 100 mg/L	使用不可 phenols and anilines 1740 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 714 mg/L Anilines (amino-meta) 2340 mg/L Baseline Toxicity 12500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amines aromatic or phenols3 15.4 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 2 mg/L	使用不可 phenols and anilines 234 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.815 mg/L Anilines (amino-meta) 5.39 mg/L Baseline Toxicity 5680 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 amines aromatic or phenols1 0.882 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
4	優先通し番号:5 CAS番号 78-79-5 イソプレン 備考: 	魚類	使用可 7.43 mg/L	使用可 basesurface narcotics 14.4 mg/L	使用可 Neutral Organics 16.9 mg/L	使用可 ○hydrocarbons aliphatic 14.6 mg/L Neutral Organics 21.2 mg/L
		甲殻類	使用可 5.77 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 13.3 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 10.1 mg/L	使用可 ○hydrocarbons aliphatic 2.66 mg/L Neutral Organics 6.80 mg/L

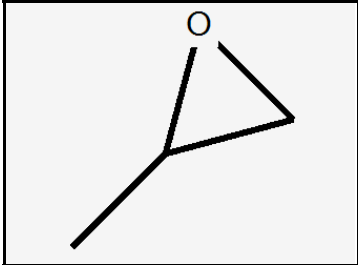
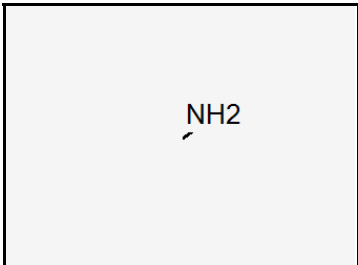
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
6	優先通し番号:103 CAS番号 111-87-5 オクタン-1-オール 備考: 	魚類	使用可 12.2 mg/L	使用可 basesurface narcotics 62.6 mg/L	使用可 Neutral Organics 20.2 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 47.9 mg/L Neutral Organics 26.3 mg/L
		甲殻類	使用可 26 mg/L	使用可 basesurface narcotics 34.1 mg/L	使用可 Neutral Organics 12.4 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 24.8 mg/L Neutral Organics 9.24 mg/L
	分子量 130.23 logP(KowWin) 2.805 ※2 対水溶解(mg/L) 814 ※1 logBCFmaxtox 2.09E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 3.42E+0~3.6E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
7	優先通し番号:45 CAS番号 71-43-2 ベンゼン 備考: 	魚類	使用可 5.9 mg/L	使用可 basesurface narcotics 51.5 mg/L	使用可 Neutral Organics 65.1 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 36.3 mg/L
		甲殻類	使用可 10 mg/L	使用可 basesurface narcotics 55.6 mg/L	使用可 Neutral Organics 36.9 mg/L	使用可 hydrocarbons aromatic 12.7 mg/L
	分子量 78.11 logP(KowWin) 1.993 ※2 対水溶解(mg/L) 2000 ※1 logBCFmaxtox 1.49E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 5.54E-1~5.54E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

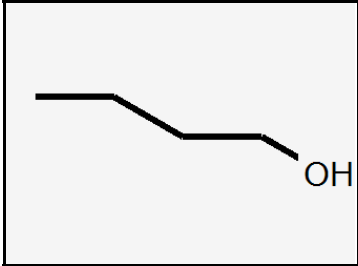
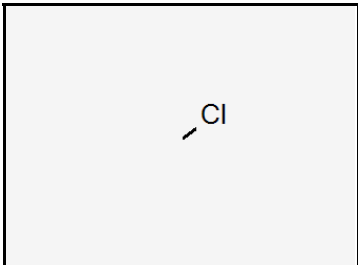
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
8	優先通し番号:16 CAS番号 124-40-3 ジメチルアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 17 mg/L	使用可 narcotic amines 309 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 232 mg/L Baseline Toxicity 3310 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 278 mg/L
		甲殻類	使用可 50 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7430 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 21.5 mg/L Baseline Toxicity 1540 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 secondary or tertiary amines 30.0 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む)
9	優先通し番号:28 CAS番号 108-05-4 酢酸ビニル 備考: 	魚類	使用可 2.39 mg/L	使用可 esters 113 mg/L	使用可 Esters 63.7 mg/L ○ Vinyl/ Allyl Esters 1.04 mg/L Baseline Toxicity 982 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 7.24 mg/L
		甲殻類	使用可 9.22 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 928 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Esters 152 mg/L ○ Vinyl/ Allyl Esters 14.9 mg/L Baseline Toxicity 496 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 conjugated systems2 12.0 mg/L

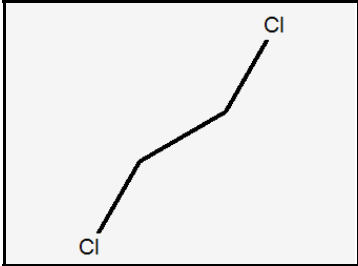
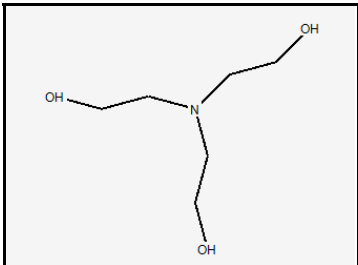
分子量 45.08 logP(KowWin) -0.173 ※2
 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -1.29E-1 ※3
 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) ※4
 ODDI ※5
 Qc ※6

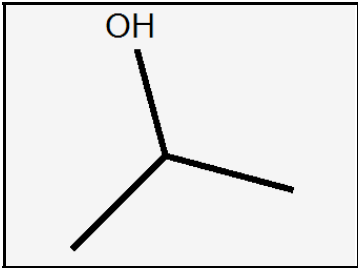
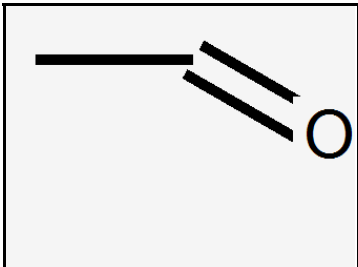
分子量 86.09 logP(KowWin) 0.728 ※2
 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 5.43E-1 ※3
 [予測値] 30250 ※1 LUMO(eV) 5.02E-1~8.58E-1 ※4
 ODDI ※5
 Qc ※6

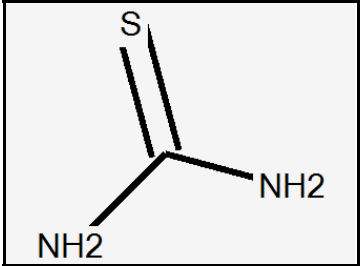
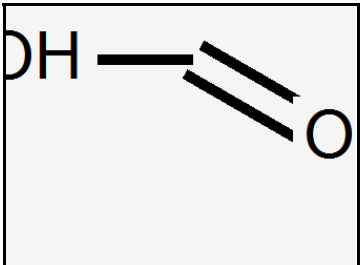
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
10	優先通し番号:25 CAS番号 50-00-0 ホルムアルデヒド 備考: 	魚類	使用可 100 mg/L	使用可 aldehydes 18.2 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 12.5 mg/L Baseline Toxicity 748 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 11.3 mg/L
		甲殻類	使用可 14.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 790 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 46.1 mg/L Baseline Toxicity 365 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 13.0 mg/L
	分子重量 30.03 logP(KowWin) 0.35 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.61E-1 ※3 [予測値] 57020 ※1 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.84E-1~2.84E-1 ※5 Qc ※6					
11	優先通し番号:131 CAS番号 108-94-1 シクロヘキサノン 備考: 	魚類	使用可 527 mg/L	使用可 basesurface narcotics 384 mg/L	使用可 Neutral Organics 491 mg/L	使用可 ○ketones 370 mg/L Neutral Organics 502 mg/L
		甲殻類	使用可 800 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 500 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 257 mg/L	使用可 Neutral Organics 88.3 mg/L
	分子重量 98.15 logP(KowWin) 1.126 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 8.4E-1 ※3 [予測値] 24080 ※1 LUMO(eV) 9.22E-1~9.32E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

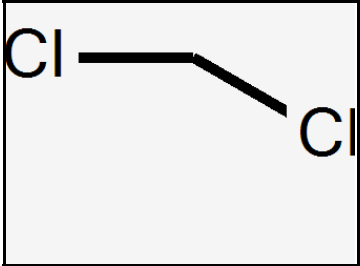
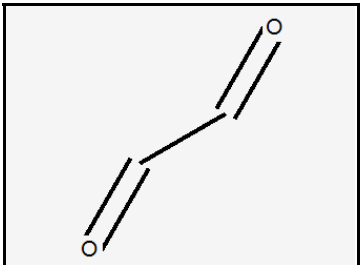
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
12	優先通し番号:20 CAS番号 75-56-9 1,2-エポキシプロパン(別名酸化プロピレン) 備考: 	魚類	使用可 52 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1910 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Epoxides, mono 45.0 mg/L Baseline Toxicity 1380 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 epoxides(ClogP) 3.28 mg/L
		甲殻類	使用可 350 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2360 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Epoxides, mono 188 mg/L Baseline Toxicity 675 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 epoxides(ClogP) 6.83 mg/L
13	優先通し番号:15 CAS番号 74-89-5 メチルアミン 備考: アミン類 	魚類	実測データなし	使用可 narcotic amines 432 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 323 mg/L Baseline Toxicity 5980 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 328 mg/L
		甲殻類	使用可 702 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 15300 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 28.3 mg/L Baseline Toxicity 2660 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 48.8 mg/L

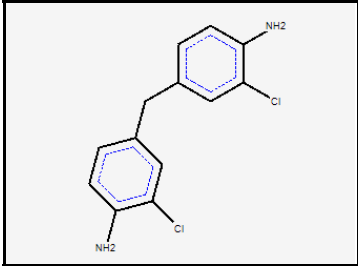
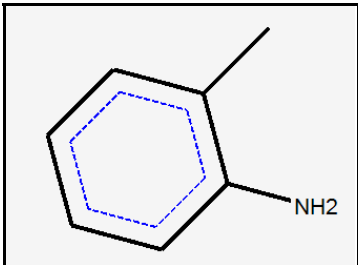
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
14	優先通し番号:124 CAS番号 71-36-3 1-ブタノール 備考: 	魚類	使用可 1376 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1490 mg/L	使用可 Neutral Organics 669 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 1290 mg/L Neutral Organics 656 mg/L
		甲殻類	使用可 1328 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1400 mg/L	使用可 Neutral Organics 341 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 252 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 103 mg/L
分子量 74.12 logP(KowWin) 0.841 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 6.27E-1 ※3 [予測値] 76700 ※1 LUMO(eV) 3.55E+0~3.6E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						
15	優先通し番号:6 CAS番号 74-87-3 クロロメタン(別名塩化メチル) 備考: 	魚類	使用可 900 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 282 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 274 mg/L	使用不可 halides3 141 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 200 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 335 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 Neutral Organics 143 mg/L	使用不可 halides3 65.2 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
分子量 50.49 logP(KowWin) 1.087 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 8.11E-1 ※3 [予測値] 22620 ※1 LUMO(eV) 1.6E+0~1.6E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6						

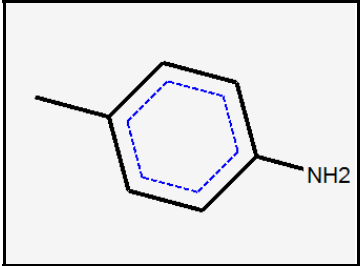
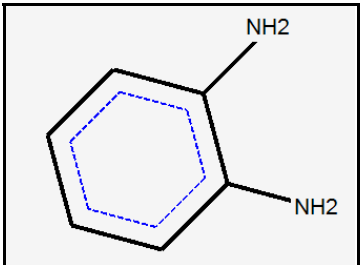
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
16	優先通し番号:11 CAS番号 107-06-2 1,2-ジクロロエタン 備考: 	魚類	使用可 118 mg/L	使用可 basesurface narcotics 93.3 mg/L	使用可 Neutral Organics 115 mg/L	使用可 halides3 72.0 mg/L
		甲殻類	使用可 99.4 mg/L	使用可 basesurface narcotics 103 mg/L	使用可 Neutral Organics 64.4 mg/L	使用可 halides3 31.0 mg/L
	分子量 98.96 対水溶解(mg/L) [予測値] 6414 ※1 logP(KowWin) 1.832 ※2 logBCFmaxtox 1.37E+0 ※3 LUMO(eV) 6.85E-1~1.13E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
17	優先通し番号:108 CAS番号 102-71-6 トリエタノールアミン 備考: アミン類 	魚類	使用可 11800 mg/L	使用可 narcotic amines 33900 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 25000 mg/L Baseline Toxicity 1280000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 36100 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 1390 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2570000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aliphatic Amines 1770 mg/L Baseline Toxicity 482000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 secondary or tertiary amines 201 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 149.19 対水溶解(mg/L) [予測値] 1000000 ※1 logP(KowWin) -2.476 ※2 logBCFmaxtox -1.85E+0 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

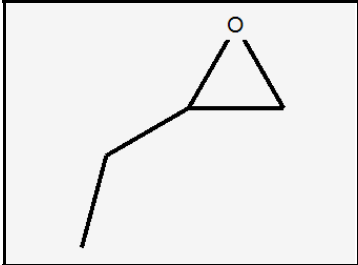
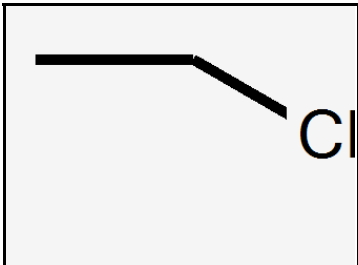
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
18	優先通し番号:102 CAS番号 67-63-0 プロピルアルコール (イソプロピルアルコール) 備考: 	魚類	使用可 9640 mg/L	使用可 basesurface narcotics 3410 mg/L	使用可 Neutral Organics 1740 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 3170 mg/L Neutral Organics 1580 mg/L
		甲殻類	使用可 2285 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 3770 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 844 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 468 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 196 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
19	優先通し番号:26 CAS番号 75-07-0 アセトアルデヒド 備考: 	魚類	使用可 30.8 mg/L	使用可 aldehydes 41.6 mg/L	使用可 ○Aldehydes (Mono) 34.3 mg/L Baseline Toxicity 3190 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 29.4 mg/L
		甲殻類	使用可 29.7 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3560 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Aldehydes (Mono) 163 mg/L Baseline Toxicity 1480 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 aldehydes 36.2 mg/L

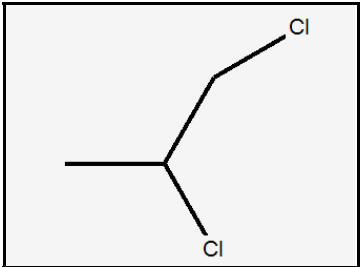
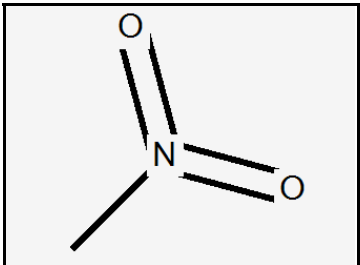
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
20	旧3監通し番号:173 優先通し 番号:40 CAS番号 チオ尿素 備考: 	魚類	使用可 110 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 21900 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OThioureas 418000 mg/L Baseline Toxicity 58700 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 6380 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 9 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 63100 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OThioureas 9.08 mg/L Baseline Toxicity 24600 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 637 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
21	優先通し番号:117 CAS番号 64-18-6 ギ酸 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 aldehydes 53.7 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用不可 Baseline Toxicity 6130 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 4470 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
		甲殻類	使用可 32.19 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7370 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 2770 mg/L ※N:判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 acids 75.6 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)

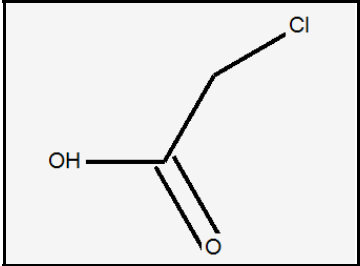
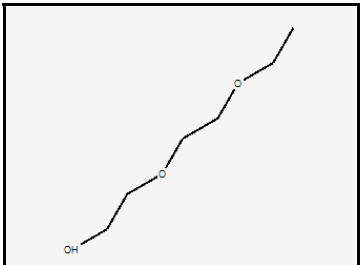
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
22	旧3監通し番号:160 優先通し 番号:7 CAS番号 75-09-2 ジクロロメタン(別名塩化メチレン) 備考: 	魚類	使用可 193 mg/L	使用可 basesurface narcotics 194 mg/L	使用可 Neutral Organics 273 mg/L	使用可 halides3 150 mg/L
		甲殻類	使用可 27 mg/L	使用可 basesurface narcotics 250 mg/L	使用可 Neutral Organics 146 mg/L	使用不可 halides3 67.8 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 84.93 logP(KowWin) 1.34 ※2 対水溶解(mg/L) 10950 ※1 logBCFmaxtox 1.E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) 5.94E-1~5.94E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
23	優先通し番号:112 CAS番号 107-22-2 オキサールアルデヒド(グリオキサール) 備考: 	魚類	使用可 > 200 mg/L	使用可 aldehydes 351 mg/L	使用可 OAldehydes (Poly) 21.6 mg/L Baseline Toxicity 91500 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 205 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 162 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 77000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OAldehydes (Poly) 38.0 mg/L Baseline Toxicity 37100 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 aldehydes 301 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 58.04 logP(KowWin) -1.655 ※2 対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logBCFmaxtox -1.24E+0 ※3 [予測値] LUMO(eV) ※4 ODDI 2.8E-1~2.88E-1 ※5 Qc ※6					

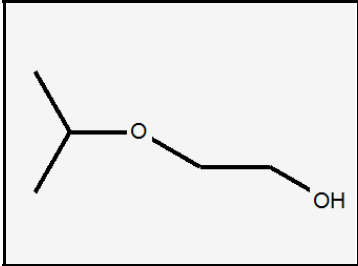
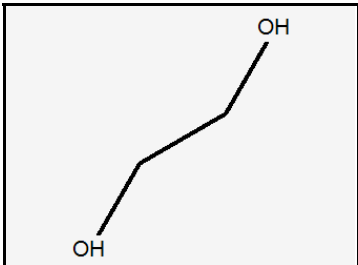
#	化学物質	対象	毒性値				
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9	
24	旧3監通し番号:76 優先通し 番号:73 CAS番号 4, 4'-ジアミノ-3, 3'-ジクロロジフェニル メタン (別名4, 4'-メチレンビス(2-クロロアニリン)) 備考: アミン類		魚類	使用可 0.61 mg/L	使用不可 phenols and anilines 5.26 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 3.60 mg/L Baseline Toxicity 10.5 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols1 0.517 mg/L
			甲殻類	使用可 0.92 mg/L	使用不可 phenols and anilines 5.84 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 1.85 mg/L Baseline Toxicity 6.82 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols3 2.40 mg/L
25	優先通し番号:57 CAS番号 95-53-4 ーートルイジン(別名:2-メチルアニリン) 備考: アミン類		魚類	使用可 151 mg/L	使用可 phenols and anilines 56.0 mg/L	使用可 ○Anilines (Hindered) 67.2 mg/L Baseline Toxicity 192 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols5 52.2 mg/L
			甲殻類	使用可 15.6 mg/L	使用不可 phenols and anilines 22.2 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Hindered) 23.3 mg/L Baseline Toxicity 105 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols5 6.64 mg/L

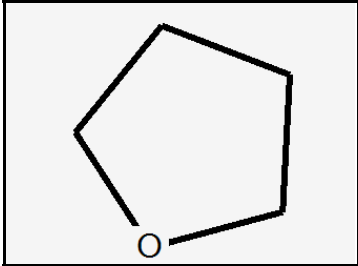
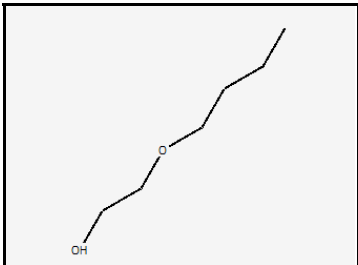
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
26	優先通し番号:155 CAS番号 106-49-0 p-トルイジン 備考: アミン類  分子量 107.16 logP(KowWin) 1.623 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.21E+0 ※3 [予測値] 7225 ※1 LUMO(eV) 6.16E-1~6.16E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 118 mg/L	使用可 phenols and anilines 56.5 mg/L	使用可 ○Anilines (Unhindered) 28.0 mg/L Baseline Toxicity 192 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 53.9 mg/L
		甲殻類	使用可 0.12 mg/L	使用不可 phenols and anilines 22.3 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 ○Anilines (Unhindered) 0.772 mg/L Baseline Toxicity 105 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 primary amines aliphatic 4.91 mg/L
27	旧3監通し番号:64 優先通し 番号:56 CAS番号 o-フェニレンジアミン 備考: アミン類  分子量 108.14 logP(KowWin) 0.159 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.19E-1 ※3 [予測値] 82150 ※1 LUMO(eV) 6.07E-1~6.07E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 4.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2270 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (amino-ortho) 44.1 mg/L Baseline Toxicity 4000 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols3 12.2 mg/L
		甲殻類	使用可 1.4 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4090 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 ○Anilines (amino-ortho) 0.882 mg/L Baseline Toxicity 1920 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 amines aromatic or phenols3 0.956 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
28	優先通し番号:21 CAS番号 106-88-7 1,2-エポキシブタン 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 946 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEpoxydes, mono 30.1 mg/L Baseline Toxicity 622 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 epoxydes(ClogP) 2.93 mg/L
		甲殻類	69.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1020 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OEpoxydes, mono 107 mg/L Baseline Toxicity 318 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 epoxydes(ClogP) 5.29 mg/L
29	優先通し番号:10 CAS番号 75-00-3 クロロエタン 備考: 	魚類	2250 mg/L	使用可 basesurface narcotics 138 mg/L	使用可 Neutral Organics 127 mg/L	使用可 halides3 74.2 mg/L
		甲殻類	58 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 144 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 69.3 mg/L	使用可 halides3 32.8 mg/L

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
30	優先通し番号:12 CAS番号 78-87-5 1, 2-ジクロロプロパン 備考: 	魚類	使用可 127 mg/L	使用可 basesurface narcotics 48.7 mg/L	使用可 Neutral Organics 55.4 mg/L	使用可 halides3 38.7 mg/L
		甲殻類	使用可 29.5 mg/L	使用可 basesurface narcotics 47.9 mg/L	使用可 Neutral Organics 32.2 mg/L	使用可 halides3 16.0 mg/L
	分子量 112.99 対水溶解(mg/L) [予測値] 2166 ※1 logP(KowWin) 2.249 ※2 logBCFmaxtox 1.68E+0 ※3 LUMO(eV) 6.85E-1~1.12E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
31	優先通し番号:18 CAS番号 75-52-5 ニトロメタン 備考: 	魚類	使用可 > 659.2 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1360 mg/L	使用可 Neutral Organics 3390 mg/L	使用不可 Unclassified 569 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	使用可 450 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 2900 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1590 mg/L	使用不可 Unclassified 90.1 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
	分子量 61.04 対水溶解(mg/L) [予測値] 111200 ※1 logP(KowWin) -0.037 ※2 logBCFmaxtox -2.75E-2 ※3 LUMO(eV) -1.31E-1~-1.31E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					

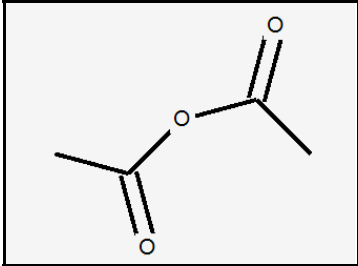
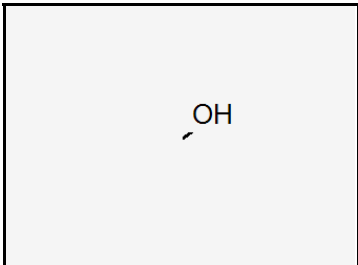
#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
32	優先通し番号:95 CAS番号 3926-62-3 モノクロル酢酸ソーダ 備考: NaをHに置換し予測 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 1330 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OHalo Acids 2560 mg/L Baseline Toxicity 2400 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 459 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	427 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2130 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用可 OHalo Acids 189 mg/L Baseline Toxicity 1170 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 83.3 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
	分子量 94.5 logP(KowWin) 0.341 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 2.54E-1 ※3 [予測値] 195300 ※1 LUMO(eV) 1.32E-1~4.71E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
33	優先通し番号:110 CAS番号 111-90-0 2-(2-エトキシエトキシ)エタノール 備考: 	魚類	使用可 ca.11775 mg/L	使用可 basesurface narcotics 27400 mg/L	使用可 Neutral Organics 28700 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 47200 mg/L Neutral Organics 22600 mg/L
		甲殻類	1982 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 48700 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 12700 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 4310 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 1880 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 134.18 logP(KowWin) -0.69 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -5.15E-1 ※3 [予測値] 828000 ※1 LUMO(eV) 2.24E+0~2.87E+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
34	優先通し番号:24 CAS番号 109-59-1 2-(1-メチルエトキシ)エタノール 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用可 basesurface narcotics 6860 mg/L	使用可 Neutral Organics 5330 mg/L	使用可 alcohols aliphatic 9420 mg/L ※f;判定留意(麻醉作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 4630 mg/L
		甲殻類	使用可 > 970 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 9410 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2520 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 1210 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 513 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 104.15 logP(KowWin) 0.002 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 1.49E-3 ※3 [予測値] 333200 ※1 LUMO(eV) 2.63E+0~2.98E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
35	優先通し番号:105 CAS番号 107-21-1 エチレングリコール 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 48300 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 38100 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 59500 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 27900 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 > 1100 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 86000 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 16100 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 4210 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 1880 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 62.07 logP(KowWin) -1.2 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -8.95E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 3.14E+0~3.24E+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
36	優先通し番号:135 CAS番号 109-99-9 テトラヒドロフラン 備考: 	魚類	使用可 2160 mg/L	使用可 basesurface narcotics 1010 mg/L	使用可 Neutral Organics 534 mg/L	使用可 Oethers aliphatic 897 mg/L Neutral Organics 530 mg/L
		甲殻類	使用可 3485 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 983 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 275 mg/L	使用可 Neutral Organics 86.4 mg/L
37	優先通し番号:109 CAS番号 111-76-2 2-ブトキシエタノール 備考: 	魚類	使用可 > 100 mg/L	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
		甲殻類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 3160 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 936 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 600 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP適用範囲外, 麻醉作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 248 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)

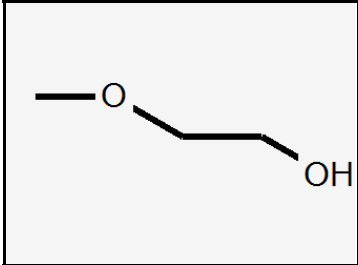
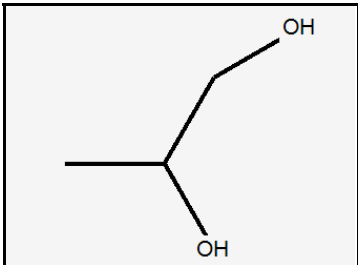
分子量 72.11 logP(KowWin) 0.937 ※2
 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 6.99E-1 ※3
 [予測値] 54480 ※1 LUMO(eV) 3.11E+0~3.11E+0 ※4
 ODDI ※5
 Qc ※6

分子量 118.18 logP(KowWin) 0.567 ※2
 対水溶解(mg/L) 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox 4.23E-1 ※3
 [予測値] 64470 ※1 LUMO(eV) 2.64E+0~3.E+0 ※4
 ODDI ※5
 Qc ※6

#	化学物質	対象	毒性値			
			実測毒性値	TIMES※7	ECOSAR※8	KATE※9
38	優先通し番号:93 CAS番号 108-24-7 無水酢酸 備考: 	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 7040 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 17300 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 2420 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
		甲殻類	3200 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 16800 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Baseline Toxicity 7750 mg/L ※N;判定不能(信頼性が低いクラス)	使用不可 Unclassified 314 mg/L 判定不能(信頼性が低いクラス)
39	優先通し番号:90 CAS番号 67-56-1 メタノール 備考: 	魚類	11850 mg/L	使用可 basesurface narcotics 11200 mg/L	使用可 Neutral Organics 6090 mg/L	使用可 Alcohols aliphatic 10100 mg/L Neutral Organics 4830 mg/L
		甲殻類	> 10000 mg/L	使用可 basesurface narcotics 15400 mg/L	使用可 Neutral Organics 2710 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 945 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 412 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外)

分子量 102.09 logP(KowWin) -0.577 ※2
 対水溶解(mg/L) 358800 ※1 logBCFmaxtox -4.31E-1 ※3
 [予測値] LUMO(eV) 1.54E-1~5.29E-1 ※4
 ODDI ※5
 Qc ※6

分子量 32.04 logP(KowWin) -0.632 ※2
 対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logBCFmaxtox -4.72E-1 ※3
 [予測値] LUMO(eV) 3.78E+0~3.78E+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
40	優先通し番号:23 CAS番号 109-86-4 エチレングリコールモノメチルエーテル 備考: 	魚類	使用可 14977 mg/L	使用可 basesurface narcotics 29200 mg/L	使用可 Neutral Organics 25500 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 41000 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP適用範囲外,麻酔作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 19500 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 27000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 50700 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 11100 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 3360 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 1480 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外)
	分子量 76.1 logP(KowWin) -0.907 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -6.76E-1 ※3 [予測値] 1000000 ※1 LUMO(eV) 2.77E+0~3.05E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6					
41	優先通し番号:106 CAS番号 57-55-6 プロピレングリコール 備考: 	魚類	使用可 51400 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 27100 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 19700 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 32100 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 15300 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		甲殻類	使用可 43500 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 42800 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 8650 mg/L	使用不可 alcohols aliphatic 2800 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) Neutral Organics 1230 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	分子量 76.1 logP(KowWin) -0.782 ※2 対水溶解(mg/L) logBCFmaxtox -5.83E-1 ※3 [予測値] 811100 ※1 LUMO(eV) 3.14E+0~3.25E+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

予測値の選択

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

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

また、予測結果の信頼性が低い以下のクラスは使用不可とした

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

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

※1 Wskowwin v1.42により算出

※2 KowWin v1.68により算出

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

LUMO : the energy of the lowest unoccupied molecular orbital

BCFmaxtox : the maximum bioconcentration factor

ODDI: the donor delocalizability of the aldehyde O-atom

QC : the charge of the C atom from 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〉