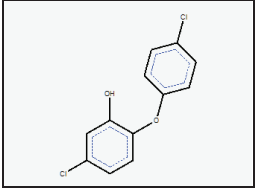
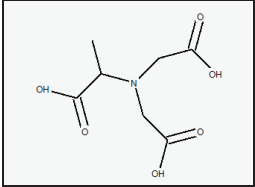
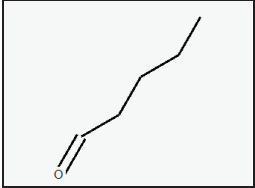
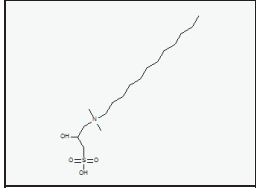
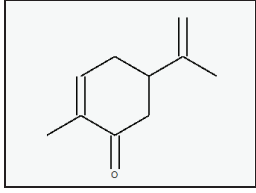
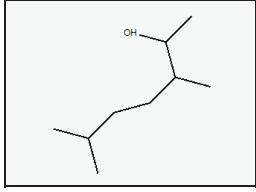
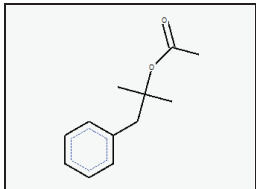
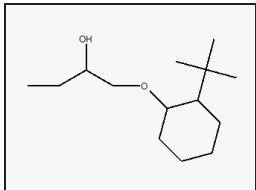
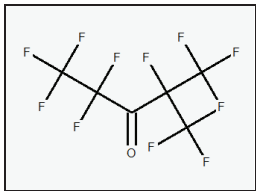
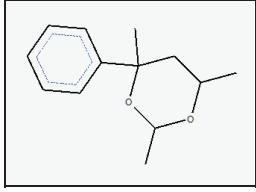
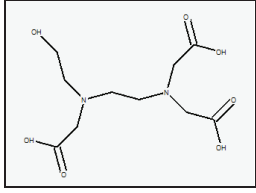
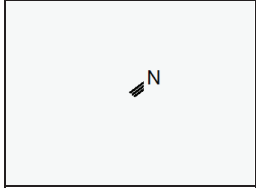
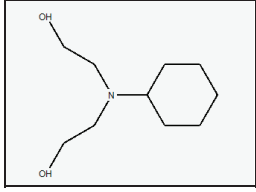
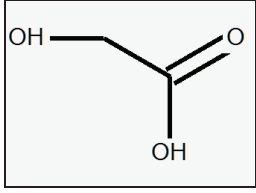
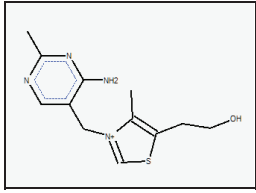


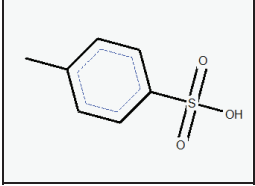
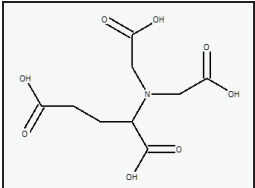
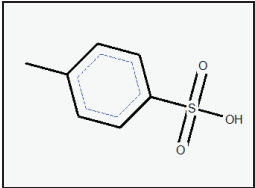
	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE2011 ※9
2	CAS番号 (3380-30-1) 5-クロロ-2-(4-クロロフェノキシ)フェノール 	藻類	0.038 mg/L	QSARモデルなし	使用可 OPhenols 3.62 mg/L Baseline Toxicity 3.55 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	0.32 mg/L	使用不可 phenols and anilines 2.38 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 OPhenols 0.958 mg/L Baseline Toxicity 2.21 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols 1.50 mg/L
		魚類	実測データなし	使用不可 phenols and anilines 1.45 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 OPhenols 1.30 mg/L Baseline Toxicity 3.23 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 amines aromatic or phenols 1.70 mg/L
3	CAS番号 (164462-16-2) トリナトリウム=2, 2'-[(1-カルボキシラテチル)イミノ]ジアセテート 	藻類	37.5 mg/L	QSARモデルなし	使用可 OAliphatic Amines-acid 249000 mg/L Baseline Toxicity 384000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	> 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.44e+7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OAliphatic Amines-acid 87400 mg/L Baseline Toxicity 404000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 secondary or tertiary amines 370 mg/L ※P, ※F:判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
		魚類	≥ 110 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2660000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OAliphatic Amines-acid 1370000 mg/L Baseline Toxicity 1.17e+7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 secondary or tertiary amines 210000 mg/L ※P, ※F:判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
4	CAS番号 110-62-3 吉草酸アルデヒド 	藻類	68.7 mg/L	QSARモデルなし	使用可 OAldehydes (Mono) 33.7 mg/L Baseline Toxicity 90.3 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	64.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 292 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OAldehydes (Mono) 25.9 mg/L Baseline Toxicity 158 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 aldehydes 11.0 mg/L
		魚類	27.9 mg/L	使用可 aldehydes 14.7 mg/L	使用可 OAldehydes (Mono) 11.3 mg/L Baseline Toxicity 296 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 aldehydes 11.0 mg/L

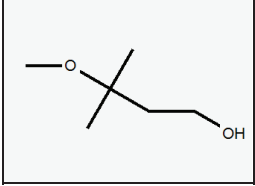
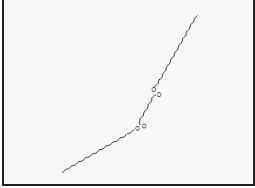
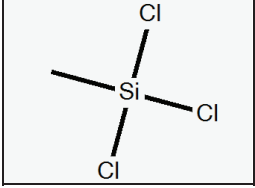
	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE2011 ※9
5	CAS番号 13197-76-7 2-ヒドロキシ-4,4-ジメチル-4-アゾニアヘキサデカンスルホナート 分子量 352.56 対水溶解(mg/L) 77060 ※1 logP(KowWin) -1.3 ※2 logBCFmaxtox 5.22E-1 ※3 LUMO(eV) 0~-3.73E+0 ※4 備考: 	藻類	4.58 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 236000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	4.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1200 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 1120000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	acids 890 mg/L ※P, ※F:判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
		魚類	55.2 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 371 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 2660000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	acids 140000 mg/L ※P, ※F:判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
6	CAS番号 6485-40-1 (R)-2-メチル-5-(プロパ-1-エン-2-イル)シクロヘキサ-2-エン-1-オン 分子量 150.22 対水溶解(mg/L) 367.1 ※1 logP(KowWin) 3.066 ※2 logBCFmaxtox 2.29E+0 ※3 LUMO(eV) -2~-7.75E-2 ※4 備考: 	藻類	19 mg/L	QSARモデルなし	使用可 ○Vinyl/Allyl Ketones 8.17 mg/L Baseline Toxicity 9.54 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	38 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.05 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Vinyl/Allyl Ketones 11.2 mg/L Baseline Toxicity 8.52 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	Neutral Organics 7.20 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
		魚類	6.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 10.4 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Vinyl/Allyl Ketones 23.5 mg/L Baseline Toxicity 13.6 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	ketones 16.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外) Neutral Organics 18.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
7	CAS番号 1247790-47-1 2-Heptanol, 3,6-dimethyl- 分子量 144.26 対水溶解(mg/L) 613.8 ※1 logP(KowWin) 3.076 ※2 logBCFmaxtox 2.3E+0 ※3 LUMO(eV) E+0~-3.5E+0 ※4 備考: 	藻類	30 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 9.02 mg/L	QSARモデルなし
		甲殻類	13 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 20.9 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 8.03 mg/L	alcohols aliphatic 18.0 mg/L ※f:判定留意 (麻酔作用を持つ部分構造を含む) ○ Neutral Organics 6.80 mg/L
		魚類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 41.0 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 12.6 mg/L	○ Alcohols aliphatic 31.0 mg/L Neutral Organics 17.0 mg/L

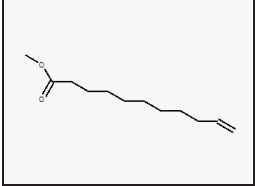
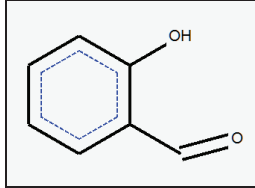
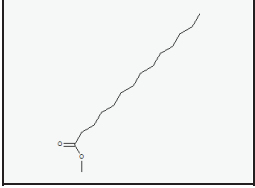
	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE2011 ※9
8	CAS番号 151-05-3 2-メチル-1-フェニルプロパン-2-イル=アセタート 分子量 192.26 対水溶解(mg/L) 54.93 ※1 logP(KowWin) 3.443 ※2 logBCFmaxtox 2.57E+0 ※3 LUMO(eV) -1~5.87E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 	藻類	実測データなし	QSARモデルなし	使用可 OEsters 2.23 mg/L Baseline Toxicity 6.70 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	15.4 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5.36 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OEsters 6.58 mg/L Baseline Toxicity 5.18 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	esters aromatic 13.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
		魚類	実測データなし	使用不可 esters 3.63 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 OEsters 3.69 mg/L Baseline Toxicity 7.99 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	esters aromatic 4.70 mg/L
9	CAS番号 (139504-68-0) 2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-1-ブタノール及び1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノールの混合物 分子量 228.38 対水溶解(mg/L) 34.85 ※1 logP(KowWin) 4.051 ※2 logBCFmaxtox 3.02E+0 ※3 LUMO(eV) +0~2.98E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノールを予測 	藻類	12 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 3.02 mg/L	QSARモデルなし
		甲殻類	5.9 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 3.29 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1.85 mg/L	alcohols aliphatic 7.00 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外) Neutral Organics 2.50 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
		魚類	4.1 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 7.57 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2.70 mg/L	alcohols aliphatic 7.30 mg/L ※f:判定留意 (麻酔作用を持つ部分構造を含む) Neutral Organics 4.20 mg/L
10	CAS番号 (756-13-8) ペルフルオロ(2-メチルペンタン-3-オン) 分子量 316.05 対水溶解(mg/L) 40.95 ※1 logP(KowWin) 2.79 ※2 logBCFmaxtox 2.08E+0 ※3 LUMO(eV) 0~-1.73E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 	藻類	10.6 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 31.2 mg/L	QSARモデルなし
		甲殻類	> 1080 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 21.3 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 31.0 mg/L	Neutral Organics 23.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)
		魚類	> 1070 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 16.9 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 50.7 mg/L	ketones 55.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外) Neutral Organics 66.0 mg/L ※F:判定不能 (部分構造適用範囲外)

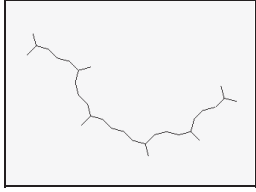
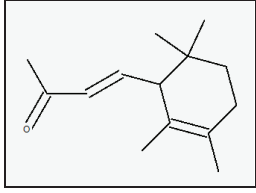
	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE2011 ※9
11	CAS番号 5182-36-5 2,4,6-トリメチル-4-フェニル-1,3-ジ オキサン 分子量 206.29 対水溶解(mg/L) 90.26 ※1 logP(KowWin) 3.107 ※2 logBCFmaxtox 2.32E+0 ※3 LUMO(eV) -1~5.31E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 	藻類	115 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 12.3 mg/L	QSARモデルなし
		甲殻類	52 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 12.5 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 10.8 mg/L	使用可 ethers with aromatic 3.20 mg/L ※f:判定留意(麻酔作用を持つ部分構造 を含む) ○ Neutral Organics 9.30 mg/L
		魚類	42.4 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 15.2 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 17.2 mg/L	使用可 Ethers with aromatic 12.0 mg/L Neutral Organics 23.0 mg/L
12	CAS番号 139-89-9 ヒドロキシエチルエチレンジアミン三酢酸塩(Na) 分子量 278.26 対水溶解(mg/L) 431000 ※1 logP(KowWin) -4.086 ※2 logBCFmaxtox -3.05E+0 ※3 LUMO(eV) 3E-1~6.E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: アミン類、評価対象物質はNa塩 	藻類	10.4 mg/L	QSARモデルなし	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 1050000 mg/L Baseline Toxicity 1580000 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	> 192500 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8.82e+7 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 313000 mg/L Baseline Toxicity 2.16e+7 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 secondary or tertiary amines 610 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
		魚類	331 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.35e+7 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 5330000 mg/L Baseline Toxicity 6.69e+7 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 secondary or tertiary amines 870000 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造 適用範囲外)
13	CAS番号 74-90-8 シアン化水素 分子量 27.03 対水溶解(mg/L) 95400 ※1 logP(KowWin) -0.693 ※2 logBCFmaxtox -5.17E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 	藻類	0.121 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity 686 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	0.042 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity 2580 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 Neutral Organics 380 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
		魚類	0.042 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity 5820 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 nitriles aliphatic 1500 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外) ○ Neutral Organics 4600 mg/L

	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE2011 ※9
14	CAS番号 4500-29-2 N, N-ビス(2-ヒドロキエチル)-N-シクロヘキシルアミン 分子量 187.28 対水溶解(mg/L) 114300 ※1 logP(KowWin) 0.767 ※2 logBCFmaxtox 5.72E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 備考: アミン類 	藻類	10.8 mg/L	QSARモデルなし	使用可 ○Aliphatic Amines 26.3 mg/L ----- Baseline Toxicity 464 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	140 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines 24.0 mg/L ----- Baseline Toxicity 998 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 secondary or tertiary amines 93.0 mg/L ※f.判定留意 (麻酔作用を持つ部分構造を含む)
		魚類	> 100 mg/L	使用可 narcotic amines 307 mg/L	使用可 ○Aliphatic Amines 232 mg/L ----- Baseline Toxicity 1970 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 secondary or tertiary amines 260 mg/L ※f.判定留意 (麻酔作用を持つ部分構造を含む)
15	CAS番号 (2836-32-0) ヒドロキシ酢酸ナトリウム 分子量 76.05 対水溶解(mg/L) 1000000 ※1 logP(KowWin) -1.067 ※2 logBCFmaxtox -7.96E-1 ※3 LUMO(eV) -1~7.21E-1 ※4 備考: 評価対象物質はNa塩 	藻類	> 41.3 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 35100 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	> 41.3 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 41300 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 152000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 conjugated systems1 150 mg/L
		魚類	> 72.2 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 16400 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 355000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 conjugated systems1 21.0 mg/L
16	CAS番号 67-03-8 3-[(4-アミノ-2-メチルピリミジン-5-イル)メチル]-5-(2-ヒドロキエチル)-4-メチルチアゾール-3-イウム=クロリド=モノヒドロクロリド 分子量 266.36 対水溶解(mg/L) 631200 ※1 logP(KowWin) -1.777 ※2 logBCFmaxtox -1.33E+0 ※3 LUMO(eV) 0~-4.71E+0 ※4 備考: アミン類 	藻類	> 100 mg/L	QSARモデルなし	使用可 ○Anilines (Hindered) 86900 mg/L ----- Baseline Toxicity 38100 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	> 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 136000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Anilines (Hindered) 13800 mg/L ----- Baseline Toxicity 216000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 amines aromatic or phenols5 390 mg/L ※P, ※F.判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
		魚類	> 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 16900 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Anilines (Hindered) 14300 mg/L ----- Baseline Toxicity 540000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 amines aromatic or phenols3 67.0 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			
			試験結果	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE2011 ※9
17	CAS番号 6192-52-5 4-メチルベンゼン-1-スルホン酸一水和物 分子量 172.2 対水溶解(mg/L) 202300 ※1 logP(KowWin) -0.618 ※2 logBCFmaxtox -4.61E-1 ※3 LUMO(eV) 1~-8.92E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 水和水を除いて予測 	藻類	304 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 38800 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	52.9 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 23500 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 142000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	acids 310 mg/L ※P, ※F, 判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
		魚類	> 98 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8250 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 317000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	acids 22000 mg/L ※P, ※F, 判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
18	CAS番号 (302337-35-5) N, N-ジカルボキシメチルグルタミン酸の部分ナトリウム塩 分子量 263.21 対水溶解(mg/L) 220600 ※1 logP(KowWin) -3.646 ※2 logBCFmaxtox -2.72E+0 ※3 LUMO(eV) E-3~3.9E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 評価対象物質はNa塩、アミン類 	藻類	試験上限濃度以上 > 94.44 mg/L	QSARモデルなし	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 484000 mg/L Baseline Toxicity 740000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	試験上限濃度以上 > 95.26 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3.13e+7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 160000 mg/L Baseline Toxicity 8570000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	secondary or tertiary amines 510 mg/L ※P, ※F, 判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
		魚類	試験上限濃度以上 > 95.26 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5350000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 ○Aliphatic Amines-acid 2590000 mg/L Baseline Toxicity 2.54e+7 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	secondary or tertiary amines 410000 mg/L ※P, ※F, 判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
19	CAS番号 104-15-4 p-トルエンスルホン酸 分子量 172.2 対水溶解(mg/L) 202300 ※1 logP(KowWin) -0.618 ※2 logBCFmaxtox -4.61E-1 ※3 LUMO(eV) 1~-8.92E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 	藻類	276 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 38800 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	48.1 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 23500 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 142000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	acids 310 mg/L ※P, ※F, 判定不能 (logP及び部分構造適用範囲外)
		魚類	> 89 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8250 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity (acid) 317000 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	acids 22000 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			
		試験結果	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE2011 ※9
CAS番号 (56539-66-3) 3-メチル-3-メトキシブタノール 分子量 118.18 対水溶解(mg/L) 134600 ※1 logP(KowWin) 0.456 ※2 logBCFmaxtox 3.4E-1 ※3 LUMO(eV) E+0~2.9E+0 ※4 備考: 	藻類	試験上限濃度以上 > 1000 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 481 mg/L	QSARモデルなし
	甲殻類	試験上限濃度以上 > 1000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 4000 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1170 mg/L	QSARモデルなし
	魚類	試験上限濃度以上 > 1000 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 3320 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2370 mg/L	QSARモデルなし
CAS番号 42233-75-0 Decanedioic acid, 1,10-didocosyl ester 分子量 819.45 対水溶解(mg/L) 1.85E-20 ※1 logP(KowWin) 23.978 ※2 logBCFmaxtox -7.97E+0 ※3 LUMO(eV) +0~-1.19E+0 ※4 備考: 	藻類	試験上限濃度以上 > 100 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Esters 4.14e-14 mg/L ※logP>6.4(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 1.74e-13 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	QSARモデルなし
	甲殻類	試験上限濃度以上 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5.10e+14 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 Esters 3.17e-12 mg/L ※logP>5.0(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 5.32e-17 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 esters aliphatic 0.0000000000 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
	魚類	試験上限濃度以上 > 100 mg/L	使用不可 esters 3.78e+10 mg/L ※D:判定不能(適用範囲外)	使用可 Esters 1.60e-11 mg/L ※logP>5.0(logP適用範囲外) Baseline Toxicity 1.23e-17 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 esters aliphatic 0.0000000000 mg/L ※P:判定不能(logP適用範囲外)
CAS番号 75-79-6 トリクロロ(メチル)シラン 分子量 149.48 対水溶解(mg/L) 1473 ※1 logP(KowWin) 2.007 ※2 logBCFmaxtox 1.5E+0 ※3 LUMO(eV) 0~-1.12E+0 ※4 備考: 	藻類	試験上限濃度以上 > 118 mg/L	QSARモデルなし	使用不可 Baseline Toxicity 51.3 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	QSARモデルなし
	甲殻類	試験上限濃度以上 > 117 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 66.4 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 68.7 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 hydrocabons aliphatic 11.0 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 35.0 mg/L ※F:判定不能(部分構造適用範囲外)
	魚類	試験上限濃度以上 > 126 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 47.4 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 Baseline Toxicity 121 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 hydrocabons aliphatic 87.0 mg/L ※P, ※F:判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) Neutral Organics 140 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			
		試験結果	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE2011 ※9
CAS番号 111-81-9 メチル=ウンデカ-10-エノート 分子量 198.31 対水溶解(mg/L) 4.709 ※1 logP(KowWin) 4.657 ※2 logBCFmaxtox 3.47E+0 ※3 LUMO(eV) +0~1.19E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 	藻類	0.55 mg/L	QSARモデルなし	使用可 OEsters 0.325 mg/L Baseline Toxicity 0.998 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
	甲殻類	1.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.529 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 OEsters 1.17 mg/L Baseline Toxicity 0.486 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	esters aliphatic 0.650 mg/L ※f:判定留意 (麻酔作用を持つ部分構造を含む)
	魚類	0.756 mg/L	使用不可 esters 0.948 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 OEsters 0.745 mg/L Baseline Toxicity 0.670 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	esters aliphatic 0.580 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外)
CAS番号 (90-02-8) サリチルアルデヒド 分子量 122.12 対水溶解(mg/L) 10670 ※1 logP(KowWin) 2.007 ※2 logBCFmaxtox 1.5E+0 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI 93E-1~2.91E-1 ※5 Qc ※6 備考: 	藻類	4.76 mg/L	QSARモデルなし	使用可 OAldehydes (Mono) 17.0 mg/L Phenols 29.1 mg/L Baseline Toxicity 42.0 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
	甲殻類	2.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 62.4 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 Aldehydes (Mono) 11.1 mg/L Phenols 6.33 mg/L Baseline Toxicity 56.2 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	aldehydes 6.80 mg/L
	魚類	1.62 mg/L	使用可 aldehydes 8.58 mg/L	使用可 OAldehydes (Mono) 6.92 mg/L Phenols 21.0 mg/L Baseline Toxicity 98.9 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	aldehydes 7.20 mg/L
CAS番号 124-10-7 メチル=テトラデカノート 分子量 242.41 対水溶解(mg/L) 0.08744 ※1 logP(KowWin) 6.266 ※2 logBCFmaxtox 4.45E+0 ※3 LUMO(eV) +0~1.17E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6 備考: 	藻類	溶解限度以上 > 0.023 mg/L	QSARモデルなし	使用可 OEsters 0.0300 mg/L Baseline Toxicity 0.0940 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
	甲殻類	溶解限度以上 > 0.02 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0378 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	使用可 Esters 0.138 mg/L ※logP>5.0 (logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0250 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	esters aliphatic 0.0620 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外)
	魚類	試験上限濃度以上 > 1000 mg/L	使用不可 esters 0.162 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Esters 0.105 mg/L ※logP>5.0 (logP適用範囲外) Baseline Toxicity 0.0290 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	esters aliphatic 0.0580 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外)

	化学物質	対象	毒性値			
			試験結果	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE2011 ※9
26	CAS番号 111-01-3 2, 6, 10, 15, 19, 23-ヘキサメチルテトラコサン 分子量 422.83 対水溶解(mg/L) 0.0002042 ※1 logP(KowWin) 14.633 ※2 logBCFmaxtox -9.95E-1 ※3 LUMO(eV) +0~3.57E+0 ※4 備考: 	藻類	試験上限濃度以上 > 100 mg/L	QSARモデルなし	使用可 Neutral Organics 2.64e-7 mg/L ※logP>6.4 (logP適用範囲外)	QSARモデルなし
		甲殻類	試験上限濃度以上 > 100 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 838000 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 2.85e-9 mg/L ※logP>5.0 (logP適用範囲外)	使用不可 hydrocarbons aliphatic 0.0000160 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外) Neutral Organics 0.00000100 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外)
		魚類	試験上限濃度以上 > 100 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 472000 mg/L ※D:判定不能 (適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 1.57e-9 mg/L ※logP>5.0 (logP適用範囲外)	使用不可 hydrocarbons aliphatic 0.000000000 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外) Neutral Organics 0.00000100 mg/L ※P:判定不能 (logP適用範囲外)
27	CAS番号 1335-46-2 メチルイオン 分子量 206.33 対水溶解(mg/L) 2.98 ※1 logP(KowWin) 4.841 ※2 logBCFmaxtox 3.6E+0 ※3 LUMO(eV) -3~8.44E-1 ※4 備考: 構造はEPIsuiteより取得。STNでは構造情報はnot available。 	藻類	> 9.42 mg/L	QSARモデルなし	使用可 ○Vinyl/Allyl Ketones 0.407 mg/L Baseline Toxicity 0.774 mg/L 判定不能 (minimum toxicity)	QSARモデルなし
		甲殻類	3.14 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.279 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)	使用可 conjugated systems2 1.40 mg/L
		魚類	3.04 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.531 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)	使用可 conjugated systems2 0.560 mg/L

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 (○印付き) 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、「結果の使用可: 溶解限度で影響なし」とする。

※1 Wskowin 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>