

平成26年度構造活性相関実施物質一覧

662 物質（抜粋）

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧
S-0006	66-25-1	ヘキサナール	-	-	-	-		60,000	-56 °C	131°C	11.3mmHg
S-0026	88-44-8	2-アミノ-5-メチルベンゼンスルホン酸	-	+	-	-		2,000	312 °C	-	-
S-0044	96-22-0	3-ペンタノン	-	-	-	-		1,000未満	-42 °C	101.5°C	3699mmHg
S-0050	98-29-3	t-ブチルカテコール	-	-	-	-		2,000	54.3 °C	285°C	0.0028mmHg
S-0074	104-83-6	1-クロロ-4-(クロロメチル)ベンゼン	+	+	-	+		5,000	31 °C	223°C	1.93mmHg
S-0124	112-85-6	ドコサン酸	-	-	-	-		100,000	79.95 °C	306°C	7.15E-08mmHg
S-0191	554-13-2	炭酸リチウム	-	-	-	-		10,000	-	-	-
S-0205	691-37-2	4-メチル-1-ペンテン	-	-	-	-		40,000	-153.6 °C	53.9°C	271.4mmHg
S-0217	1071-93-8	アジピン酸ジヒドラジド	+	-	+	+		1,000	181.8 °C	-	-
S-0239	1333-16-0	ジヒドロキシジフェニルメタン[別名:ビスフェノールF]	-	-	-	-		100,000	163 °C	-	-
S-0245	1667-10-3	4, 4'-ビスクロロメチルビフェニル	+	+	-	+		1,000	138 °C	184 °C	-
S-0253	2224-15-9	多価アルコール(エチレングリコール, ポリエチレングリコール, プロピレングリコール, ポリプロピレングリコール, トリメチロールプロパン, グリセリン)のグリシジルポリエーテル	+	-	+	+		1,000	-	112 °C	0.14 mmHg
S-0262	2768-02-7	ビニルトリメトキシシラン	-	予測不能	-	-		2,000	-	123°C	-
S-0273	3319-31-1	トリス(2-エチルヘキシル)=1, 2, 4-ベンゼントリカルボキシラート	-	-	-	-		9,000	-	414°C	3.94E-11mmHg
S-0283	3896-11-5	2-(2'-ヒドロキシ-3'-t-ブチル-5'-メチルフェニル)-5-クロロベンゾトリアゾール	-	-	-	-		10,000	144-147 °C	-	-
S-0297	5281-04-9	ピグメントレッド-57-1	+	-	+	+		4,000	>300 °C	-	-
S-0378	10476-85-4	塩化ストロンチウム					無機化合物のため、計算できない	3,000	874 °C	1250°C	-
S-0421	17418-58-5	1-アミノ-4-ヒドロキシ-2-フェノキソラキノン	-	+	+	+		1,000未満	183.8 °C	-	2.1E-12mmHg
S-0446	24937-79-9	ポリ(ビニリデンフルオライド)					ポリマー系であり、構造が不明確のため、計算できない	6,000	-	-	-
S-0812	6362-80-7	4-メチル-2, 4-ジフェニルペンタ-1-エン	-	-	-	-		X	-	172°C	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧
S-0823	79-39-0	メタクリルアミド	-	-	-	-		X	110.5 °C	ca. 215°C	0.105mmHg
S-0830	78-32-0	りん酸トリトリル	-	-	-	-		7,000	77.5 °C	224°C	2.61E-08mmHg
S-0835	110-83-8	シクロヘキセン					H25年 構造 活性相関実 施済み	X	-103.5 °C	83°C	89mmHg
S-0842	29253-36-9	1-イソプロピルナフタレン又は2-イソプロ ピルナフタレン	-	-	+	-		3	-	-	0.037mmHg
S-0846	118-69-4	2, 6-ジクロロトルエン	-	-	-	-		5,000	25.8 °C	198°C	0.255mmHg
S-0850	793-24-8	N-(1, 3-ジメチルブチル)-N'-フェニ ル-p-フェニレンジアミン	-	-	-	-		20,000	46 °C	164°C	6.525mmHg
S-0855	95-31-8	N-(tert-ブチル)-2-ベンゾチアゾール スルフェンアミド	-	-	+	-		5,000	108 °C	-	1.03E-06mmHg
S-0915	941-69-5	N-フェニルマレイミド	-	-	-	-		X	89-89.8 °C	162°C	8.99E-07mmHg
S-0924	16079-88-2	1-ブロモ-3-クロロ-5, 5-ジメチルイ ミダゾリジン-2, 4-ジオン	-	-	-	-		X	163-164 °C	-	6.61E-06 mmHg
S-0982	29964-84-9	メタクリル酸アルキル(C=2~20)	-	-	-	-		30,000	-	-	-
S-0987	111-86-4	1-オクタンアミン	-	-	-	-		4,000	0 °C	179.6 °C	0.9671 mmHg
S-0987	143-27-1	モノアルキル(又はアルケニル, C=5~2 8)アミン	-	-	-	-		4,000	-	-	-
S-0994	75-59-2	テトラアルキル(C1~7)アンモニウム塩	-	-	-	-		0	0	0	0
S-0998	107-39-1	オクテン	-	-	-	-		100,000	-93.5 °C	101.4°C	75mmHg
S-0998	107-40-4	オクテン	-	-	-	-		100,000	-	-	-
S-1000	11138-60-6	トリメチロールプロパン 脂肪族モノカルボン 酸(C=6~24)エステル	-	-	-	-		2,000	-	-	-
S-1003	7756-94-7	アルケン(C=10~50)	-	-	-	-		40,000	-	177°C	-
S-1010	75-97-8	3, 3-ジメチル-2-ブタノン	-	-	-	-		500,000	-52.5 °C	106.2°C	31.5mmHg
S-1010	110-12-3	アルキル(C=1~16)メチルケトン	-	-	-	-		500,000	-74 °C	144°C	5.2mmHg
S-1010	563-80-4	アルキル(C=1~16)メチルケトン	-	-	-	-		500,000	-94.4 °C	94.2°C	52.11mmHg
S-1010	928-68-7	6-メチル-2-ヘプタノン	-	-	-	-		500,000	<-50 °C	167 °C	3.4 hPa
S-1011	112-86-7	アルケニルモノカルボン酸(C=5~23)	-	-	-	-		9,000	33.8 °C	381.5°C	-
S-1012	2223-93-0	ステアリン酸カドミウム(II)	-	-	-	-		10,000	134 °C	-	-
S-1014	7299-99-2	ペンタエリスリトールアルキルエステル(C5 ~20)	-	-	-	-		9,000	-	-	-
S-1017	93-83-4	(Z)-N, N-ビス(2-ヒドロキシエチル)オ レアミド	-	-	-	-		2,000	-	-	5.88E-13 mmHg
S-1019	32072-96-1	アルケニル(C8~50)無水コハク酸	-	-	-	-		X	-	275.5°C	<0.99975mmHg
S-1020	110-33-8	アジピン酸アルキル(C=1~13)	-	-	-	-		20,000	-9 °C	348°C	2.86E-06mmHg
S-1020	26401-35-4	アジピン酸アルキル(C=1~13)	-	-	-	-		20,000	-	-	-
S-1022	94-13-3	ヒドロオキシ安息香酸アルキル(C=1~2 2)	-	-	-	-		5,000	96-97 °C	-	0.000555mmHg

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-1023	91696-73-0	アルキル(C=10~50)ベンゼンスルホン酸塩(Ca, Na, K, Mg, Ba)					炭素数が未定であり、構造が不明確のため計算で				
S-1023	1322-98-1	デシルベンゼンスルホン酸ナトリウム	-	-	-	-		5,000	-	-	-
S-1023	26248-24-8	トリデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム	-	-	-	-		5,000	-	-	-
S-1023	27636-75-5	ウンデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム	-	-	-	-		5,000	-	-	-
S-1023	28348-61-0	テトラデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム	-	-	-	-		5,000	-	-	-
S-1027	90-00-6	2-エチルフェノール	-	-	-	-		X	-3.4 ℃	204.52℃	0.153mmHg
S-1027	95-65-8	ポリ(1~3)アルキル(C=1~3)ポリ(1~3)ヒドロキシポリ(1~5)フェニル	-	-	-	-		20,000	-	-	-
S-1027	108-68-9	ポリ(1~3)アルキル(C=1~3)ポリ(1~3)ヒドロキシポリ(1~5)フェニル	-	-	-	-		20,000	63.4 ℃	221.74℃	0.055mmHg
S-1027	526-75-0	ポリ(1~3)アルキル(C=1~3)ポリ(1~3)ヒドロキシポリ(1~5)フェニル	-	-	-	-		20,000	-	-	-
S-1027	620-17-7	ポリ(1~3)アルキル(C=1~3)ポリ(1~3)ヒドロキシポリ(1~5)フェニル	-	-	-	-		0	0	0	0
S-1027	700-13-0	ポリ(1~3)アルキル(C=1~3)ポリ(1~3)ヒドロキシポリ(1~5)フェニル	-	+	-	-		X	169 ℃	-	0.0075mmHg
S-1228	1336-93-2	Naphthenic acids, manganese salts					構造不明のため計算できな	1,000	-	-	-
S-1237	95-13-6	石油樹脂を製造する際の未反応芳香族炭化水素(C=9~10)留分	-	-	-	-		1,000未満	-1.8 ℃	181.6℃	1.086mmHg
S-1239	118-52-5	1, 3-ジクロロ-5, 5-ジメチルヒダントイン	-	-	-	-		X	132 ℃	-	-
S-1246	62-23-7	p-ニトロ安息香酸	+	+	+	+		1,000未満	242 ℃	-	2.53E-06mmHg
S-1247	63-74-1	4-アミノスルホンアミド	-	-	-	-		X	164.5-166.5 ℃	-	7.3E-06mmHg
S-1274	77-85-0	2-メチル-2-ヒドロキシメチル-1, 3-プロパンジオール	-	-	-	-		X	204 ℃	136℃	-
S-1307	81-77-6	6, 15-ジヒドロジナフト[2, 3-a:2, 3-h]フェナジン-5, 9, 14, 18-テトラオン	-	-	-	-		X	470-500 ℃	-	2.00E-18mmHg
S-1315	85-41-6	フタルイミド	-	-	-	-		X	238 ℃	310℃	1.0E-08mmHg
S-1386	95-32-9	4-(1, 3-ベンゾチアゾール-2-イルジスルファニル)モルホリン	-	-	+	-		1,000未満	135 ℃	-	3.00E-07mmHg
S-1411	98-59-9	p-トルエンスルホクロリド	+	-	-	-		X	69-71 ℃	146℃	0.5mmHg
S-1414	99-04-7	m-トルイル酸	-	-	-	-		1,000	109.9 ℃	263℃	0.000236mmHg
S-1423	99-94-5	p-トルイル酸	-	-	-	-		1,000	179.6 ℃	274-275℃	5.08E-05mmHg
S-1444	102-70-5	トリアリルアミン	+	+	-	+		X	-70 ℃	155.5℃	2.61mmHg
S-1450	103-24-2	ビス(2-エチルヘキシル)=アゼラート	-	-	-	-		4,000	-78 ℃	237℃	-
S-1467	105-16-8	メタクリル酸2-(ジエチルアミノ)エチル	-	-	-	-		1,000未満	<-60 ℃	80 ℃	0.114 mmHg
S-1493	107-66-4	ジブチルホスファート	-	-	-	-		1,000未満	-13 ℃	136℃	0.975mmHg
S-1518	109-56-8	Ethanol, 2-[(1-methylethyl)amino]-	-	-	-	-		2,000	-	-	-
S-1530	110-26-9	N, N'-メチレンビスアクリルアミド	-	-	-	-		X	-	-	-
S-1541	111-21-7	トリエチレングリコールジアセテート	-	-	+	-		X	-	-	-
S-1550	111-88-6	1-オクタンチオール	-	-	-	-		6,000	-49.2 ℃	199.1℃	0.4245mmHg
S-1584	120-54-7	ジペンタメチレンチウラムテトラスルフィド	-	-	-	-		1,000未満	96-98 ℃	-	-
S-1587	121-03-9	2-メチル-5-ニトロベンゼンスルホン酸	+	+	+	+		X	135.8 ℃	-	0.0063mmHg
S-1595	122-01-0	4-クロロベンゾイルクロリド	+	-	+	+		1,000未満	16 ℃	222℃	-
S-1609	126-00-1	4, 4'-ビス(4-ヒドロキシフェニル)吉草酸	-	-	-	-		X	171-172 ℃	-	-
S-1617	130-13-2	ナフチオン酸ナトリウム	-	+	+	+		1,000未満	280 ℃	-	1.55E-14mmHg

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-1619	130-17-6	2-(4'-アミノフェニル)-6-メチルベンゾチアゾール-7-スルホン酸	+	-	+	+		X	-	-	-
S-1654	141-30-0	3, 6-ジクロルピリダジン	-	-	-	-		X	-	-	-
S-1675	150-38-9	Trisodium hydrogen ethylenediaminetetraacetate	-	-	-	-		8,000	-	-	-
S-1688	301-13-3	Tris(2-ethylhexyl) phosphite	-	-	-	-		1,000未満	-	-	-
S-1765	582-25-2	Potassium benzoate	-	-	-	-		1,000未満	-	-	-
S-1800	620-92-8	4, 4'-ジヒドロキシジフェニルメタン	-	-	-	-		X	162.5 °C	-	8.84E-07mmHg
S-1810	638-16-4	1, 3, 5-トリフタリル-2, 4, 6-トリフェノール	-	-	-	-		X	>300 °C	100°C	1.32E-04mmHg
S-1836	840-65-3	2, 6-ナフタレンジカルボン酸ジメチルエステル	-	-	-	-		X	190 °C	215°C	2.5E -06mmHg
S-1837	842-18-2	7-ヒドロキシ-1, 3-ナフタリン=ジスルホン酸カリウム塩	-	+	-	-		X	-	-	-
S-1848	923-26-2	2-ヒドロキシプロパン-1-イル=メタクリラート	-	-	-	-		2,000	-	90°C	0.0724mmHg
S-1868	1066-40-6	トリメチルシラノール	-	予測不能	-	-		X	-	99-100 °C	13.8 mmHg
S-1922	1317-40-4	硫化銅(II)					無機化合物のため計算できない	X	220 °C	-	-
S-1940	1345-13-7	酸化セリウム	-	予測不能	予測不能	-*		7,000	-	-	-
S-1952	1552-42-7	3, 3-ビス(p-ジメチルアミノフェニル)-6-ジメチルアミノフタリド	-	-	-	-		X	179-180 °C	-	-
S-1975	1747-60-0	6-メトキシ-2-アミノベンゾチアゾール	+	+	+	+		X	-	-	-
S-1983	1843-05-6	2-ヒドロキシ-4-n-オクチルオキシベンゾフェノン	-	-	-	-		1,000未満	45-46 °C	>400°C	3.45mmHg
S-2048	2580-78-1	リアクティブブルー-19	-	-	+	-		1,000未満	-	-	-
S-2066	2680-03-7	N, N-ジメチルアクリルアミド	-	-	-	-		X	-	81°C	-
S-2081	2915-49-3	ビス(2-エチルヘキサン-1-イル)=シクロヘキサ-4-エン-1, 2-ジカルボキシラート	-	-	-	-		X	-	-	-
S-2088	3012-65-5	ジアンモニウム=2-(カルボキシメチル)-2-ヒドロキシブタンジオアート又はジアンモニウム=2-カルボキシ-2-ヒドロキシペンタンジオアート及びその混合物	-	-	-	-			-	-	-
S-2115	3251-23-8	ビス(硝酸)銅(II)	-	+	予測不能	-*		1,000未満	255-256 °C	150-225°C	-
S-2190	5124-25-4	ディスパーズエロー42	+	+	+	+		1,000未満	159.85 °C	-	2.11E-11mmHg
S-2207	5460-09-3	4-アミノ-5-ヒドロキシ-2, 7-ナフタリン=ジスルホン酸モノナトリウム塩	-	-	-	-		1,000未満	>380 °C	-	-
S-2227	6099-57-6	1-ナフトール-4-スルホン酸ナトリウム塩	-	-	+	-		X	170 °C	-	-
S-2244	6448-95-9	C. I. ピグメントレッド22	+	+	+	+		1,000未満	-	-	-
S-2246	6471-49-4	ピグメント レッド-23	+	+	+	+		X	-	-	-
S-2567	13936-21-5	2-ペンチルアンスラキノン	-	-	+	-		1,000未満	85.4-86.4 °C	227°C	-
S-2938	27104-30-9	テトラキス(ヒドロキシメチル)ホスホニウムクロリド・尿素縮合物	-	-	-	-		X	-	-	-
S-2969	27676-62-6	1, 3, 5-トリス(3', 5'-ジ-tert-ブチル-4'-ヒドロキシベンジル)イソシアヌル	-	-	-	-		1,000	218-220 °C	-	-
S-3119	35948-25-5	9, 10-ジヒドロ-9-オキサ-10-ホスファフェナントレン-10-オキサイド	-	-	+	-		3,000	115-119 °C	200°C	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-3328	57455-37-5	C. I. ピグメントブルー29					構造不明のため計算できな	1,000未満	-	-	-
S-4097	103-69-5	N-エチルアニリン	-	-	-	-		X	-63.5 ℃	204.5℃	3mmHg
S-4103	1897-45-6	テトラクロロイソフタロニトリル(別名クロロタロニル又はTPN)	-	-	-	-		1,000未満	250-251 ℃	350℃	<0.01mmHg
S-4105	100-40-3	4-ビニル-1-シクロヘキセン	-	-	-	-		X	-	-	-
S-4106	115-28-6	1, 4, 5, 6, 7, 7-ヘキサクロロビシクロ[2. 2. 1]-5-ヘプテン-2, 3-ジカルボン酸(別名クロレンド酸)	-	-	-	-		X	232 ℃	-	3.04E-08mmHg
S-4109	119-93-7	3, 3'-ジメチルベンジジン(別名o-トリジン)	+	+	+	+		X	129-131 ℃	300 ℃	6.92E-07mmHg
S-4144	103-83-3	N, N-ジメチルベンジルアミン	-	-	-	-		1,000未満	-75 ℃	181℃	0.587mmHg
S-4146	97-52-9	2-メトキシ-4-ニトロアニリン	+	+	+	+		1,000未満	141 ℃	-	-
S-4147	119-47-1	6, 6'-ジ-tert-ブチル-4, 4'-ジメチル-2, 2'-メチレンジフェノール	-	-	-	-		1,000	131 ℃	187℃	2.5E-09mmHg
S-4148	100-54-9	3-シアノピリジン	-	-	-	-		1,000未満	51 ℃	206.9℃	0.4mmHg
S-4150	95-73-8	2, 4-ジクロロトルエン	-	-	-	-		5,000	-13.5 ℃	201℃	0.4579mmHg
S-4168	102-81-8	2-(ジ-n-ブチルアミノ)エタノール	-	-	-	-		1,000未満	75 ℃	225-227 ℃	3.4 kPa
S-4177	101-61-1	4, 4'-メチレンジビス(N, N-ジメチル-1-ヒド)	+	-	-	-		X	2 ℃	192-194℃	0.503mmHg
S-4178	4286-23-1	4-(1-メチルエチニル)フェノール	-	-	-	-		X	83-84 ℃	136-137℃	-
S-4184	112-26-5	1, 2-ビス(2-クロロエトキシ)エタン	+	+	+	+		X	-31.5 ℃	232℃	0.06mmHg
S-4186	88-60-8	2-tert-ブチル-5-メチルフェノール	-	-	-	-		20,000	46.5 ℃	127℃	0.022419mmHg
S-4187	80-51-3	4, 4'-オキシビス(ベンゼンスルホノヒドラジド)	+	-	+	+		X	130 ℃	140-160℃	-
S-4190	84-51-5	2-エチル-9, 10-アントラキノ	-	+	+	+		1,000未満	108.8 ℃	-	1.02E-06mmHg
S-4192	1025-15-6	1, 3, 5-トリアリル-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン	-	-	-	-		1,000	20.5 ℃	149℃	-
S-4193	76-83-5	クロロ(トリフェニル)メタン	-	-	-	-		X	113.5 ℃	310℃	3.87E-06mmHg
S-4202	882-33-7	ジフェニルジスルファン	-	-	-	-		X	62 ℃	310℃	0.00022mmHg
S-4212	56-93-9	ベンジル(トリメチル)アンモニウム=クロリド	-	-	-	-		2,000	243 ℃	>135℃	2.18E-07mmHg
S-4213	81-16-3	2-アミノナフタレン-1-スルホン酸	-	+	+	+		1,000未満	100 ℃	-	5.26E-10mmHg
S-4218	542-18-7	クロロシクロヘキサン	-	-	-	-		X	-44 ℃	142℃	6.73mmHg
S-4219	103-44-6	3-[(ビニルオキシ)メチル]ヘプタン	-	-	+	-		1,000	-85 ℃	177-178℃	-
S-4231	88-18-6	2-tert-ブチルフェノール	-	-	-	-		30,000	-6.8 ℃	223℃	0.00015mmHg
S-4234	31127-54-5	2, 3, 4, 4'-テトラクロロクハフナフェ	-	-	-	-		1,000未満	219 ℃	-	-
S-4240	88-09-5	2-エチルブタン酸	-	-	-	-		100,000	約-15 ℃	194-195℃	0.188mmHg
S-4242	123-07-9	4-エチルフェノール	-	-	-	-		1,000未満	45 ℃	217.9℃	0.0372mmHg
S-4245	90-02-8	サリチルアルデヒド	-	-	-	-		1,000未満	-7 ℃	196-197 ℃	0.593 mmHg
S-4262	3048-65-5	3a, 4, 7, 7a-テトラクロロ-1H-イソ	-	-	-	-		X	-	50℃	-
S-4265	2581-34-2	3-メチル-4-ニトロフェノール	-	+	+	+		X	129 ℃	-	0.000632mmHg
S-4279	611-19-8	1-クロロ-2-(クロロメチル)ベンゼン	+	+	-	+		5,000	-17 ℃	217℃	3mmHg
S-4285	123-30-8	p-アミノフェノール	-	+	-	-		1,000	189.6-190.2 ℃	284℃	0.075mmHg
S-4286	615-58-7	2, 4-ジブロモフェノール	-	-	-	-		X	38 ℃	238.5℃	0.00134mmHg
S-4933	630-08-0	一酸化炭素	+	+	+	+		10,000,000	-	-	-
S-4969	10196-18-6	硝酸亜鉛	-	+	予測不能	-*			-	-	-
S-4970	1344-08-7	硫化ナトリウム					構造不明のため計算できな	10,000	-	-	-
S-4992	144-49-0	モノフルオール酢酸	-	-	-	-		X	35.2 ℃	168℃	12.8mmHg
S-4996	13952-84-6	モノブチルアミン	-	-	-	-		1,000	-	-	-
S-5073	61788-76-9	塩化ノルマルパラフィン(C8~22)	+	-	+	+					

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-5075	142-71-2	銅(II)＝ジアセタート	-	-	-	-		4,000	115 ℃	240 ℃	1.79E-05 mmHg
S-5075	543-90-8	酢酸塩(Pb, Cd, Hg, Mn, Fe, Rh, Sr, Sn, Sb, Pd, Cr, Co, Ni, Ba, Rb, Ag, Zn, Cu)	-	-	-	-		4,000	255 ℃	-	-
S-5075	1600-27-7	酢酸塩(Pb, Cd, Hg, Mn, Fe, Rh, Sr, Sn, Sb, Pd, Cr, Co, Ni, Ba, Rb, Ag, Zn, Cu)	-	-	-	-		4,000	179 ℃	-	-
S-5077	105-46-4	酢酸ブチル	-	-	-	-		60,000	-98.9 ℃	112-113℃	22.3mmHg
S-5083	76-71-1	Diethyl sec-butylethylmalonate	-	-	-	-		4,000	-	-	-
S-5088	999-61-1	多価アルコール脂肪族不飽和一塩基酸エステル(ただし多価アルコールは C3～10で2～4のヒドロキシル基を有する。脂肪族不飽和一塩基酸はC3～4)	-	-	-	-		2,000	-	225℃	0.038mmHg
S-5089	354-23-4	1, 2-ジクロロ-1, 1, 2-トリフルオロエタン	-	-	-	-		X	-	-	-
S-5089	812-04-4	1, 1-ジクロロ-1, 2, 2-トリフルオロエタン	-	-	-	-		X	-	-	-
S-5089	34077-87-7	ジクロロ(トリフルオロ)エタン	-	-	-	-		0	0	0	0
S-5099	121-92-6	モノ又はジニトロ安息香酸	+	+	+	+		1,000未満	141.1 ℃	-	3.71E-05mmHg
S-5105	1331-61-9	直鎖アルキル(C6～14)ベンゼンスルホン酸及びその塩(K, Na, Li, Ca)	-	-	-	-		40,000	-	-	-
S-5105	50854-94-9	ウンデシルベンゼンスルホン酸	-	-	-	-		40,000	-	-	-
S-5108	88-53-9	アミノクロロトルエンスルホン酸及びその塩(Li, Na, Ni, K, Ca)	-	+	-	-		1,000未満	>305 ℃	>400℃	-
S-5110	103-65-1	プロピルベンゼン	-	-	-	-		70,000	-99.2 ℃	159.2℃	2.5mmHg
S-5110	104-51-8	n-ブチルベンゼン	-	-	-	-		X	-88.5 ℃	183.1℃	1.02mmHg
S-5111	135-98-8	ブチルベンゼン	-	-	-	-		X	-82.7 ℃	173.5℃	1.75mmHg
S-5111	538-93-2	ブチルベンゼン	-	-	-	-		X	-51.4 ℃	170.5℃	1.35mmHg
S-5116	2579-20-6	1, 3-ビス(アミノメチル)シクロヘキサン	-	-	-	-		X	<-70 ℃	220℃	0.131mmHg
S-5138	120-95-6	2, 4-ジ-tert-ペンチルフェノール	-	-	-	-		20,000	26 ℃	169℃	-
S-5140	79-74-3	2, 5-ジアルキル(C=4～8)ハイドロキノン	-	-	-	-		1,000未満	-	-	-
S-5511	32492-61-8	ポリオキシアルキレン(C=2～3)ビスフェノールAエーテル					炭素数が未定であり、構造が不明確のため計算で	6,000	-	-	-
S-5543	4074-88-8	Oxydiethylene diacrylate	-	-	-	-		2,000	-	-	-
S-5825	5323-95-5	ヒマシ油脂肪酸(Na, K, Li, Ca)塩	-	-	-	-					
S-4261	57-09-0	ヘキサデシル(トリメチル)アンモニウム＝ブロミド	-	-	-	-		4000	237-243 ℃	-	-
S-0004	62-54-4	Acetic acid, calcium salt	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-1259	75-24-1	Trimethylaluminium	-	予測不能	-	-		3000	-	-	-
S-1262	75-54-7	ジクロロ(メチル)シラン	-	予測不能	-	-		9000	-93 ℃	41℃	428mmHg
S-0994	77-98-5	N, N, N-トリエチルエタンアミニウム＝ヒドロキシド	-	-	-	-		4000	49～50 ℃	-	-
S-0997	78-08-0	Triethoxy(vinyl)silane	-	予測不能	-	-		2000	-	160 ℃	7 hPa
S-1000	78-17-1	2-[(デカノイルオキシ)メチル]-2-エチルプロパン-1, 3-ジイル＝ジデカノアート	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-1007	78-91-1	アミノプロパノール	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-1289	79-03-8	プロパノイルクロリド	+	-	+	+		4000	-94 ℃	80 ℃	106 hPa

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧
S-0019	80-04-6	水素化ビスフェノールA	-	-	-	-		4000	144-146 °C	230-234°C	-
S-1314	84-77-5	ジデカン-1-イル=フタレート	-	-	-	-		90000	2.5 °C	240°C	7.89E-09mmHg
S-1330	88-20-0	トルエンスルホン酸	-	-	-	-		9000	-	-	-
S-0028	89-32-7	1, 2, 4, 5-ベンゼンテトラカルボン酸無水物	-	-	-	-		3000	285.3 °C	397-400°C	1.47E-05mmHg
S-1022	94-26-8	ブチルパラベン	-	-	-	-		5000	68-69 °C	156-157°C	0.000186mmHg
S-1377	94-28-0	2, 2'-(エチレンビスオキシ)ジエタン-1-イル=ビス(2-エタン-1-イルヘキサノアート)	-	-	-	-		10000	-50 °C	344°C	1.9mmHg
S-1392	95-92-1	ジエチル=オキサレート	-	-	-	-		6000	-40.6 °C	185.7°C	0.4132mmHg
S-0042	96-14-0	3-メチルペンタン	-	-	-	-		20000	-162.9 °C	63.27°C	153.75mmHg
S-1396	96-70-8	2-tert-butyl-4-ethylphenol	-	-	-	-		20000	-	-	-
S-0047	97-61-0	2-methylvaleric acid	-	-	-	-		100000	-	-	-
S-0049	97-93-8	トリエチルアルミニウム	-	予測不能	予測不能	-*		3000	-46 °C	194°C	0.02559mmHg
S-1405	97-95-0	2-ethylbutan-1-ol	-	-	-	-		400000	-	-	-
S-0053	98-67-9	p-フェノールスルホン酸	-	-	-	-		1000	-	-	3.33E-07mmHg
S-5111	98-82-8	クメン	-	-	-	-		800000	-96.02 °C	152-153 °C	0.61 kPa
S-0056	99-63-8	イソフタル酸ジクロリド	+	-	+	+		4000	43.5 °C	276°C	0.03mmHg
S-1429	100-99-2	トリイソブチルアルミニウム	-	予測不能	予測不能	-*		3000	6 °C	86°C	0.0256mmHg
S-0062	101-43-9	シクロヘキシル=メタクリレート	-	-	-	-		7000	-	210°C	0.191mmHg
S-5148	101-68-8	ジフェニルメタンジイソシアネート	+	-	-	-		1000	37 °C	196°C	<7.5E -06mmHg
S-1455	104-15-4	p-トルエンスルホン酸	-	-	-	-		9000	106-107 °C	140°C	2.7E -06mmHg
S-0077	105-75-9	Dibutyl fumarate	-	-	-	-		2000	-13.5 °C	285 °C	5.32E-03 mmHg
S-1020	105-97-5	ジデカン-1-イル=アジパート	-	-	-	-		20000	26.8-27.2 °C	244°C	-
S-0080	106-25-2	Nerol	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-1482	106-70-7	Methyl hexanoate	-	-	-	-		1000	-	-	-
S-1483	106-79-6	ジメチル=デカン-1, 10-ジオアート	-	-	-	-		4000	38 °C	175°C	-
S-0987	107-85-7	3-メチルブタン-1-イルアミン	-	-	-	-		4000	-68 °C	95°C	-
S-1500	108-00-9	N, N-ジメチルエチレンジアミン	-	-	-	-		4000	-	104°C	-
S-1010	108-10-1	メチルイソブチルケトン	-	-	-	-		500000	-84.7 °C	117-118 °C	2.64 kPa
S-1522	109-68-2	Pent-2-ene	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-1526	110-03-2	2,5-Hexanediol, 2,5-dimethyl-	-	-	-	-		70000	-	-	-
S-1018	110-31-6	エチレンビス脂肪族モノカルボン酸アミド(C 6~24)	-	-	-	-		7000	114-115 °C	-	-
S-1533	110-41-8	Undecanal, 2-methyl-	-	-	-	-		60000	-	119 °C	4.17E-02 mmHg
S-1534	110-42-9	メチル=デカノアート	-	-	-	-		1000	-18 °C	224°C	0.0487mmHg
S-0101	110-73-6	2-ethylaminoethanol	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-5062	110-81-6	ジエチルジスルファン	-	-	-	-		1000	-101.5 °C	154°C	4.28mmHg
S-1539	111-11-5	メチル=オクタノアート	-	-	-	-		1000	-40 °C	192.9°C	0.54mmHg
S-1543	111-31-9	1-ヘキサントール	-	-	-	-		6000	-	-	-
S-1546	111-70-6	1-ヘプタノール	-	-	-	-		400000	-	-	-
S-1547	111-75-1	2-(ブタン-1-イルアミノ)エタノール	-	-	-	-		2000	-2.1 °C	199°C	-
S-1552	112-11-8	Isopropyl oleate	-	-	-	-		40000	-	-	-
S-1553	112-16-3	ドデカノイル=クロリド	+	-	+	+		4000	-17 °C	145°C	-
S-0112	112-38-9	Undec-10-enoic acid	-	-	-	-		9000	-	-	-
S-1554	112-47-0	Decane-1,10-diol	-	-	-	-		70000	-	-	-
S-0116	112-50-5	トリエチレングリコールモノエチルエーテル	-	-	-	-		7000	-19 °C	256°C	0.051mmHg
S-0117	112-54-9	Dodecanal	-	-	-	-		60000	44.5 °C	185 °C	100 Pa

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-0119	112-61-8	メチル＝ステアラート	-	-	-	-		40000	39.1 ℃	443℃	1.36E-05mmHg
S-1556	112-63-0	メチル＝(9Z, 12Z)－オクタデカ－9, 12－ジエノアート	-	-	-	-		40000	-35 ℃	212℃	3.67E-06mmHg
S-1557	112-64-1	テトラデカノイル＝クロリド	+	-	+	+		4000	-1 ℃	171℃	-
S-1558	112-67-4	ヘキサデカノイル＝クロリド	+	-	+	+		4000	12 ℃	199℃	9.01E-04mmHg
S-0121	112-69-6	N, N－ジメチルヘキサデカン－1－イルアミン	-	-	-	-		6000	12 ℃	330℃	-
S-1559	112-75-4	N, N－ジメチルテトラデカン－1－イルアミン	-	-	-	-		6000	-	146-148℃	-
S-0128	115-83-3	2, 2－ビス[(ステアロイルオキシ)メチル]プロパン－1, 3－ジイル＝ジステアラート	-	-	-	-		4000	60-66 ℃	-	-
S-0130	116-37-0	4, 4'－プロパン－2, 2－ジイルビス(フェノキシプロパン－2－オール)	-	-	-	-		8000	-	-	5.09E-11 mmHg
S-1573	118-88-7	アミノトルエンスルホン酸	-	+	+	+		2000	-	-	-
S-1585	120-55-8	Diethylene glycol, dibenzoate	-	-	-	-		1000	-	-	-
S-1020	123-79-5	ジオクタン－1－イル＝アジパート	-	-	-	-		20000	9.6 ℃	191℃	8.5E -07mmHg
S-1605	123-94-4	2, 3－ジヒロキシプロパ－1－イル＝オクタデカノアート	-	-	-	-		10000	78-81 ℃	-	-
S-0147	123-95-5	ブタン－1－イル＝ステアラート	-	-	-	-		40000	27 ℃	343℃	5.8E -06mmHg
S-1606	123-96-6	2－オクタノール	-	-	-	-		400000	-38.6 ℃	178.5℃	0.24mmHg
S-0148	123-99-9	Azelaic acid	-	-	-	-		8000	106.5 ℃	286.5 ℃	1 mmHg
S-0153	124-22-1	ドデカン－1－アミン	-	-	-	-		4000	28.3 ℃	259℃	0.0085mmHg
S-0856	124-28-7	N, N－ジメチルオクタデシルアミン	-	-	-	-		6000	22.89 ℃	194℃	-
S-0155	124-29-8	1-Hexadecanol	-	-	-	-		400000	-	-	-
S-4273	126-72-7	トリス(2, 3－ジプロモプロパン－1－イル)＝ホスファート	+	+	+	+		7000	5.5 ℃	390℃	0.00019mmHg
S-4278	128-04-1	ナトリウム＝N, N－ジメチルジチオカルバマート	+	-	+	+		8000	121 ℃	-	4.17E-09mmHg
S-1627	135-01-3	ジエチルベンゼン	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-1635	136-30-1	ナトリウム＝N, N－ジブタン－1－イルジチオカルバマート	+	-	-	-		8000	-	-	-
S-1636	136-51-6	カルシウム＝ビス(2－エチルヘキサノアート)	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-1651	141-02-6	フマル酸ジ(2－エチルヘキシル)	-	-	-	-		2000	-58 ℃	197℃	-
S-1652	141-05-9	Diethyl maleate	-	-	-	-		1000	-8.8 ℃	219.5 ℃	1 hPa
S-1657	141-75-3	ブチリル＝クロリド	+	-	+	+		4000	-89 ℃	101-102℃	39.1mmHg
S-1658	141-93-5	m－ジエチルベンゼン	-	-	-	-		3000	-83.9 ℃	181.1℃	1.13mmhg
S-1659	142-16-5	ビス(2－エチルヘキサン－1－イル)＝マレアート	-	-	-	-		1000	-45 ℃	156℃	<0.0075mmHg
S-1660	142-17-6	Calcium dioleate	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-1664	142-77-8	オレイン酸n－ブチル	-	-	-	-		40000	-26.4 ℃	227℃	2.63E-06mmHg
S-0173	142-90-5	ドデカン－1－イル＝メタクリラート	-	-	-	-		30000	-7 ℃	142℃	0.00118mmHg
S-1667	143-08-8	ノナン－1－オール	-	-	-	-		400000	-5 ℃	215 ℃	2.284E-02 mmHg
S-1670	147-71-7	酒石酸	-	-	-	-		1000	-	-	-
S-1007	156-87-6	アミノプロパノール	-	-	-	-		2000	12.4 ℃	187.5℃	0.077mmHg
S-1012	301-08-6	2－エチルヘキサン酸鉛(II)	-	-	-	-		10000	-	-	-
S-1012	301-10-0	スズ＝ビス(2－エタン－1－イルヘキサノアート)	-	-	-	-		10000	-	-	-
S-1713	503-74-2	Isovaleric acid	-	-	-	-		100000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧
S-1714	504-53-0	18-ペンタトリアコンタノン	-	-	-	-		1000	89 °C	270°C	-
S-1715	504-63-2	プロパン-1, 3-ジオール	-	+	-	-		90000	-	-	-
S-1716	505-32-8	3, 7, 11, 15-テトラメチルヘキサデカ-1-エン-3-オール	-	-	-	-		5000	>230 °C	335°C	<0.00075mmHg
S-1717	506-51-4	1-Tetracosanol	-	-	-	-		400000	-	-	-
S-0188	537-01-9	炭酸セリウム	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-1742	543-80-6	酢酸バリウム(II)	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-1011	544-71-8	(9E, 11E)-オクタデカ-9, 11-ジエン酸	-	-	-	-		9000	-	-	-
S-1747	546-89-4	Lithium acetate	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-1748	553-90-2	ジメチル=オキサラート	-	-	-	-		6000	54 °C	163-164°C	1.14mmHg
S-1012	557-07-3	亜鉛=ジオレアート	-	-	-	-		10000	-	-	-
S-1756	563-46-2	2-Methylbut-1-ene	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-1758	563-78-0	2,3-dimethylbut-1-ene	-	-	-	-		7000	-	-	-
S-1760	571-58-4	1, 4-ジメチルナフタレン	-	-	+	-		4000	-	-	-
S-4031	585-34-2	3-tert-ブチルフェノール	-	-	-	-		30000	42.3 °C	240°C	0.00159mmHg
S-1771	590-29-4	Potassium formate	-	-	-	-		9000	157 °C	-	Zero
S-1775	591-65-1	バリウム=ジオレアート	-	-	-	-		30000	350 °C	-	-
S-1776	593-29-3	Potassium stearate	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-1798	619-82-9	シクロヘキサン-1, 4-ジカルボン酸	-	-	-	-		1000	-	-	-
S-1799	620-20-2	alpha,3-dichlorotoluene	+	+	-	+		5000	-	-	-
S-4410	623-53-0	エチル=メチル=カルボナート	-	-	-	-		2000	-14 °C	107.5°C	-
S-4227	624-92-0	ジメチルジスルファン	-	-	-	-		1000	-84.67 °C	109.74°C	28.7mmHg
S-1808	629-54-9	ヘキサデカンアミド	-	-	-	-		1000	107 °C	236°C	-
S-5075	631-60-7	酢酸水銀(I)	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-1811	638-38-0	酢酸マンガン(II)	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-0779	681-84-5	オルトケイ酸テトラメチル(別名テトラメトキシシラン)	-	予測不能	-	-		5000	-1 °C	121°C	16.5mmHg
S-1819	686-31-7	Tert-pentyl 2-ethylperoxyhexanoate	-	-	-	-		3000	-	68 °C	-
S-1820	690-37-9	2-Pentanol, 2,4,4-trimethyl-	-	-	-	-		400000	-20 °C	147.5 °C	0.3076 kPa
S-1830	822-12-8	ミリスチン酸ナトリウム	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-1003	872-05-9	アルケン(C=10~50)	-	-	-	-		40000	-66.3 °C	170.5°C	1.67mmHg
S-0213	917-61-3	シアン酸ナトリウム	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-1852	928-95-0	Trans-hex-2-en-1-ol	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-1854	929-77-1	Methyl docosanoate	-	-	-	-		40000	-	-	-
S-1867	1066-35-9	Silane, chlorodimethyl-	-	予測不能	-	-		9000	-	-	-
S-1876	1076-97-7	シクロヘキサン-1, 4-ジカルボン酸	-	-	-	-		1000	312.5 °C	300°C	1.46E-07mmHg
S-1879	1113-21-9	(6E, 10E)-3, 7, 11, 15-テトラメチルヘキサデカ-1, 6, 10, 14-テトラエン-3-オール	-	-	-	-		5000	0 °C	250°C	1.56E-06mmHg
S-1884	1120-16-7	Lauramide	-	-	-	-		1000	-	-	-
S-1885	1120-34-9	Methyl (Z)-docos-13-enoate	-	-	-	-		40000	-	-	-
S-1892	1189-08-8	ブタン-1, 3-ジイル=ジメタクリラート	-	-	-	-		2000	-	290°C	-
S-1908	1310-65-2	水酸化リチウム					無機化合物のため計算できない	4000	-	-	-
S-0980	1313-97-9	酸化ネオジミウム	-	予測不能	予測不能	-*		1000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-5881	1314-11-0	酸化ストロンチウム					無機化合物のため計算できない	2000	-	-	-
S-1913	1314-41-6	四酸化三鉛	-	予測不能	予測不能	-*		30000	about 500 °C	-	10mmHg
S-1920	1317-34-6	酸化マンガン	-	予測不能	予測不能	-*		60000	-	-	-
S-1921	1317-35-7	四酸化三マンガン					無機化合物のため計算できない	60000	-	-	-
S-0231	1317-36-8	酸化鉛(II)					無機化合物のため計算できない	30000	888 °C	-	1mmHg
S-0233	1318-23-6	水酸化アルミニウム	-	予測不能	-	-		1000000	-	-	-
S-1931	1330-19-4	Isoheptanoic acid	-	-	-	-		100000	-	-	-
S-1020	1330-86-5	アジピン酸アルキル(C=1~13)	-	-	-	-		20000	-	-	-
S-0976	1332-29-2	酸化スズ					無機化合物のため計算できない	2000	-	-	-
S-1935	1335-30-4	ケイ酸アルミニウム	-	予測不能	-	-		10000	-	-	-
	1335-30-4		-	予測不能	予測不能	-*					
S-1003	1599-67-3	ドコサー１－エン	-	-	-	-		40000	38 °C	367 °C	1.15E-04 hPa
S-1010	1604-34-8	6, 10-ジメチルウンデカン-2-オン	-	-	-	-		500000	-	-	-
S-0244	1634-02-2	5, 10-ジブタン-1-イル-5, 10-ジアザ-7, 8-ジチアテトラデカン-6, 9-ジチオン	+	-	-	-		1000	39.5 °C	-	1.53E-09 mmHg
S-1965	1663-39-4	tert-ブチル=アクリラート	-	-	-	-		1000	69 °C	120°C	12mmHg
S-0829	1694-82-2	テトラヒドロメチル無水フタル酸	-	+	-	-		7000	63 °C	-	-
S-1972	1731-79-9	ジメチル=ドデカンジオアート	-	-	-	-		4000	31.9 °C	-	0.00237mmHg
S-0851	1806-26-4	p-オクチルフェノール	-	-	-	-		30000	43 °C	276 °C	-
S-1981	1830-78-0	グリセロールメタクリレート	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-1021	1852-04-6	ウンデカン二酸	-	-	-	-		8000	-	-	-
S-1990	1985-51-9	2, 2-ジメチルプロパン-1, 3-ジイル=ジメタクリラート	-	-	-	-		2000	-	87°C	0.0276mmHg
S-1991	2001-94-7	Glycine, N,N'-1,2-ethanediyibis[N-(carboxymethyl)-, potassium salt (1:2)]	-	-	-	-		8000	-	-	-
S-0987	2016-42-4	Tetradecylamine	-	-	-	-		4000	83.1 °C	291.2 °C	1.01E-04 kPa
S-1993	2049-95-8	tert-アミルベンゼン[別名:tert-ペンチルベンゼン]	-	-	-	-		800000	-	192.4°C	-
S-2000	2156-97-0	Dodecyl acrylate	-	-	-	-		70000	4 °C	120 °C	-
S-5049	2215-35-2	(T-4)-ビス[O, O-ビス(4-メチルペンタン-2-イル)=ホスホロジチオアート-K S, K S']亜鉛(II)					構造不明のため計算できない	3000	<10 °C	>130°C	-
S-2006	2219-82-1	6-tert-ブチル-ο-クレゾール	-	-	-	-		20000	31 °C	230°C	-
S-2007	2223-82-7	2,2-dimethyl-1,3-propanediyl diacrylate	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2009	2283-08-1	ヒドロキシナフトエ酸	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-2023	2426-02-0	テトラヒドロフタル酸無水物	-	-	+	-		3000	74 °C	-	-
S-1012	2452-01-9	亜鉛(II)=ジドデカノアート	-	-	-	-		10000	129 °C	-	-
S-2029	2457-01-4	Barium bis(2-ethylhexanoate)	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-0982	2495-25-2	トリデカン-1-イル=メタクリラート	-	-	-	-		30000	-	118°C	-
S-0982	2495-27-4	ヘキサデシル=メタクリラート	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-2039	2499-59-4	Octyl acrylate	-	-	-	-		70000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧
S-2044	2528-39-4	トリヘキサン-1-イル=ホスファート	-	-	-	-		1000	-	160.8°C	-
S-0982	2549-53-3	テトラデカン-1-イル=メタクリラート	-	-	-	-		30000	10 °C	191°C	-
S-2046	2550-33-6	Tert-butyl 2-ethylperoxybutyrate	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-2052	2598-99-4	Octadecyl palmitate	-	-	-	-		9000	-	-	-
S-2053	2599-01-1	Hexadecyl myristate	-	-	-	-		9000	-	-	-
S-2054	2601-98-1	Magnesium dipalmitate	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-2055	2602-34-8	[3-(2,3-epoxypropoxy)propyl]triethoxysilane	+	予測不能	+	+		3000	-	-	-
S-1012	2605-44-9	ラウリン酸カドミウム(II)	-	-	-	-		10000	101 °C	-	-
S-2059	2627-95-4	Disiloxane, 1,3-diethenyl-1,1,3,3-tetramethyl-	-	予測不能	-	-		40000	-	-	-
S-2064	2666-14-0	Trisodium hydrogen (1-hydroxyethylidene)bisphosphonate	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-0260	2687-91-4	1-エチルピロリジン-2-オン	-	-	-	-		20000	-	97°C	0.103mmHg
S-2069	2736-40-5	ジエチルアセチルククロライド	+	-	+	+		4000	-	-	-
S-2070	2778-96-3	オクタデカン-1-イル=ステアラート	-	-	-	-		9000	60 °C	-	-
S-2100	3069-19-0	ヘキサン-1-イル(トリメトキシ)シラン	-	予測不能	-	-		2000	-	202-203°C	-
S-0268	3164-85-0	カリウム=2-エチルヘキサノアート	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-1003	3452-07-1	イコサ-1-エン	-	-	-	-		40000	28.5 °C	341 °C	1.40E-05 hPa
S-0282	3794-83-0	Tetrasodium (1-hydroxyethylidene)bisphosphonate	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2150	3913-02-8	2-butyloctan-1-ol	-	-	-	-		400000	-	-	-
S-2151	3937-56-2	ノナン-1, 9-ジオール	-	-	-	-		70000	45.8 °C	173 °C	<0.01 hPa
S-1022	4247-02-3	4-ヒドロキシ安息香酸イソブチル	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-2176	4485-12-5	リチウム=オクタデカノアート	-	-	-	-		30000	220-221 °C	-	-
S-2180	4664-49-7	1-ヒドロキシプロパン-2-イル=メタクリラート	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2181	4696-57-5	Barium dilaurate	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-2183	4720-86-9	テトラヒドロフタルイミド	-	-	-	-		3000	169-170 °C	-	-
S-0289	4813-57-4	オクタデカン-1-イル=アクリラート	-	-	-	-		70000	32-34 °C	-	-
S-1000	4826-87-3	2-エチル-2-[(オクタノイルオキシ)メチル]プロパン-1, 3-ジイル=ジオクタノアート	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-0290	4986-89-4	2, 2-ビス[(アクリロイルオキシ)メチル]プロパン-1, 3-ジイル=ジアクリラート	-	-	-	-		2000	17.3 °C	-	-
S-0294	5153-25-3	2-エチルヘキサン-1-イル=4-ヒドロキシベンゾアート	-	-	-	-		5000	-	268-270°C	-
S-2201	5314-55-6	Ethyltrimethoxysilane	-	予測不能	-	-		2000	-	-	-
S-0299	5412-01-1	2-(2-イソプロポキシエトキシ)エタノール	-	-	-	-		40000	-	110°C	-
S-2206	5435-64-3	3, 5, 5-トリメチルヘキサナール	-	-	-	-		60000	<-60 °C	67-68°C	1.4mmHg
S-1018	5518-18-3	N, N'-エタン-1, 2-ジイルビスパルミトアミド	-	-	-	-		7000	-	-	-
S-2218	5809-08-5	1,1,3,3-tetramethylbutyl hydroperoxide	+	-	+	+		7000	-	-	-
S-2225	5919-74-4	グリセロールメタクリレート	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-0982	6140-74-5	ペンタデシル=メタクリラート	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-2252	6606-59-3	1,6-hexanediyl bismethacrylate	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2259	6865-35-6	バリウム=ビスオクタデカノアート	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-4990	6891-44-7	メチル硫酸化メタクリル酸エチル, トリメチルアンモニウム	-	+	-	-		4000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧
	6891-44-7		-	-	+	-					
S-2261	6920-22-5	ヘキサノー 1, 2-ジオール	-	-	-	-		70000	-	-	-
S-2268	7283-69-4	Diisobutyl fumarate	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2269	7283-70-7	Diisopropyl fumarate	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2274	7341-17-5	2-ethylhexane-1-thiol	-	-	-	-		6000	-	-	-
S-2275	7360-38-5	トリス(2-エチルヘキサン酸)グリセリル	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-2278	7425-14-1	2-ethylhexyl 2-ethylhexanoate	-	-	-	-		1000	-	-	-
S-1012	7428-48-0	Stearic acid, lead salt	-	-	-	-		10000	約 100 °C	-	-
S-2282	7446-81-3	アクリル酸ナトリウム	-	-	-	-		1000	>300 °C	-	-
S-2286	7540-51-4	(-)-3,7-dimethyloct-6-en-1-ol	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-1017	7545-23-5	N, N-ビス(2-ヒドロキシエチル)テトラデカンアミド	-	-	-	-		2000	52-55 °C	-	-
S-2290	7585-41-3	バリウム=4-[(5-クロロ-4-メチル-2-スルホフェニル)ジアゼニル]-3-ヒドロキシナフタレン-2-カルボナート	+	-	-	-		1000	-	-	2.9E-19 mmHg
S-0990	7620-77-1	リチウム=12-ヒドロキシステアラート	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-2299	7647-19-0	五フッ化リン	-	-	-	-		2000	-93.8 °C	-84.6°C	-
S-0970	7722-76-1	リン酸アンモニウム	-	-	-	-		8000	-	-	-
S-4969	7779-88-6	硝酸亜鉛	-	+	予測不能	-*		4000	約36 °C	-	-
S-0317	7779-90-0	リン酸亜鉛	-	-	-	-		8000	900 °C	-	approx. 0mmHg
S-0763	7783-54-2	三フッ化窒素	-	-	-	-		4000	-208.5 °C	-129°C	-
S-0322	7789-29-9	フッ化水素カリウム					無機化合物のため計算できない	2000	239 °C	-	-
S-4936	7789-75-5	フッ化カルシウム					無機化合物のため計算できない	4000	1403 °C	2500°C	-
S-0331	8050-28-0	ロジンのマレイン酸化物					構造不明のため計算できない	2000	-	-	-
S-2335	8052-10-6	トール油ロジン					構造不明のため計算できない	20000	-	-	-
S-2348	9004-36-8	酢酸ラク酸セルロース					構造不明のため計算できない	1000	171-184 °C	-	-
S-2349	9004-39-1	セルロースの酢酸及びプロパン酸エステル					構造不明のため計算できない	100000	188-210 °C	-	-
S-2350	9004-57-3	セルロースのエチルエーテル					構造不明のため計算できない	2000	165-175 °C	-	3.70E-13mmHg
S-2351	9004-64-2	セルロースの2-ヒドロキシプロピルエーテル					構造不明のため計算できない	2000	-	-	-
S-5823	9004-65-3	ヒドロキシプロピルメチルセルロース					構造不明のため計算できない	10000	-	-	7.89E-20mmHg
S-0343	9004-70-0	ニトロセルロース					構造不明のため計算できない	2000	-	-	1.41E-17mmHg
S-2373	9011-53-4	2-Propenoic acid, 2-methyl-, butyl ester, polymer with 2-methylpropyl 2-methyl-2-propenoate					構造不明のため計算できない	300000	-	-	-
S-2374	9012-09-3	セルロースの三酢酸エステル					構造不明のため計算できない	100000	-	-	-
S-2385	9018-04-6	1,4-Butanediol, polymer with .alpha.-hydro-.omega.-hydroxypoly(oxy-1,4-butanediyl) and 1,1'-methylenebis[4-					構造不明のため計算できない	20000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-5822	9032-42-2	メチルヒドロキシ エチルセルロース					構造不明のため計算できない	4000	-	-	-
S-0362	9049-76-7	デンプンの(2-ヒドロキシプロパン-1-イル)エーテル					構造不明のため計算できない	40000	-	-	-
S-2414	9079-98-5	Neodecanoic acid, ethenyl ester, polymer with ethene and ethenyl acetate					構造不明のため計算できない	1000	-	-	-
S-2419	10024-47-2	Isobutyl oleate	-	-	-	-		40000	-	-	-
S-4943	10026-13-8	五塩化リン	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-4927	10035-10-6	臭化水素					無機化合物のため計算できない	10000	-	-	-
S-0974	10042-76-9	硝酸ストロンチウム	-	+	予測不能	-*		20000	-	-	-
S-2429	10101-52-7	ケイ酸ジルコニウム	-	予測不能	-	-		10000	-	-	-
S-2430	10102-24-6	ケイ酸リチウム	-	予測不能	-	-		5000	-	-	-
S-1003	10192-32-2	アルケン(C=10~50)	-	-	-	-		40000	96.76 ℃	379.97 ℃	1.53E-05 hPa
S-2437	10213-78-2	2, 2'-(オクタデカン-1-イルイミノ)ジエタノール	-	-	-	-		6000	45.8 ℃	-	-
S-1021	10347-88-3	脂肪族ジカルボン酸(C=9~13)	-	-	-	-		8000	-	-	-
S-2442	10361-65-6	リン酸アンモニウム(第三)	-	+	-	-		8000	-	-	-
S-0998	11071-47-9	オクテン	-	-	-	-		100000	-	-	-
S-0382	11130-73-7	炭化タングステン					構造不明のため計算できない	5000	-	6000℃	-
S-0981	12009-31-3	チタン酸バリウム					無機化合物のため計算できない	8000	-	-	-
S-2468	12027-67-7	モリブデン酸アンモニウム(1244067/NOO 24)	-	予測不能	予測不能	-*		2000	90 ℃	-	-
S-4960	12030-97-6	チタン酸カリウム	-	予測不能	予測不能	-*		7000	-	-	-
S-2474	12036-01-0	酸化ジルコニウム					無機化合物のため計算できない	20000	-	-	-
S-0385	12047-27-7	三酸化一チタン(IV)-バリウム	-	予測不能	予測不能	-*		8000	-	-	-
S-2482	12057-24-8	酸化リチウム					無機化合物のため計算できない	1000	-	-	-
S-0388	12068-56-3	ケイ酸アルミニウム	-	予測不能	-	-		10000	-	-	-
S-0392	12141-46-7	ケイ酸アルミニウム	-	予測不能	予測不能	-*		10000	-	-	-
	12141-46-7		-	予測不能	-	-					
S-2499	12202-17-4	三塩基性硫酸鉛(Pb4O3(SO4))	-	-	-	-		1000	-	-	-
	12202-17-4		-	+	予測不能	-*					
S-2500	12207-64-6	モリブデン酸アンモニウム	-	予測不能	予測不能	-*		2000	-	-	-
S-2515	12627-14-4	ケイ酸リチウム					無機化合物のため計算できない	5000	-	-	-
S-2518	12680-02-3	酸化ランタン					無機化合物のため計算できない	1000	-	-	-
S-2524	13019-22-2	Dec-9-en-1-ol	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-2525	13040-18-1	Potassium decanoate	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-2526	13048-34-5	1,10-decanediyl diacrylate	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2529	13122-18-4	Tert-butyl 3,5,5-trimethylperoxyhexanoate	-	-	-	-		3000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-2530	13154-24-0	Silane, chlorotris(1-methylethyl)-	-	予測不能	-	-		9000	-	-	-
S-0992	13197-74-5	スルホコハク酸モノ又はジアルキル(又はアルケニル, C=8~24)エステル塩(Na, K,	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2537	13393-68-5	2-メチルペンタン-2-イル=ヒドロペルオキシド	+	-	+	+		7000	-	-	-
S-2539	13429-27-1	Potassium myristate	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-0402	13530-50-2	リン酸アルミニウム	-	-	-	-		6000	-	-	-
S-2546	13530-58-0	リン酸アルミニウム					無機化合物のため計算できない	6000	-	-	-
S-2559	13776-88-0	リン酸アルミニウム	-	+	予測不能	-*		6000	-	-	-
S-2562	13822-56-5	1-Propanamine, 3-(trimethoxysilyl)-	-	予測不能	-	-		1000	-	91 - 92 °C	-
S-2570	13987-01-4	プロピレントリマー					構造不明のため計算できない	7000	-	268 °C	47.3 mmHg
S-2572	14103-61-8	ビス(3, 5, 5-トリメチルヘキサノ-1-イル)=フタレート	-	-	-	-		90000	26-29 °C	170°C	-
S-2573	14117-96-5	1,2-Benzenedicarboxylic acid, 1,2-dioctadecyl ester	-	-	-	-		90000	-	-	-
S-0977	14623-75-7	炭酸セリウム	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-2589	15467-20-6	Disodium hydrogen nitrilotriacetate	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-2599	15721-78-5	Bis(4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenyl)amine	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2600	15782-05-5	ピグメントレッド-48:3	+	予測不能	予測不能	-*		1000	-	-	-
S-1012	15956-58-8	脂肪族モノカルボン酸(C=6~28)塩(Pb, Cu, Mn, Zn, Zr, Ce, Cd, Sn, Sr, Co)	-	予測不能	予測不能	-*		10000	-	-	-
S-1125	16096-31-4	ポリ(2~6)ヒドロキシアルカン(C3~10)のグリンジルエーテル又は2-メチルグリンジルエーテル	+	+	+	+		1000	-	-	-
S-2609	16245-97-9	[(octadecyloxy)methyl]oxirane	+	-	+	+		3000	42-43 °C	-	-
S-1012	16260-27-8	脂肪族モノカルボン酸(C=6~28)塩(Pb, Cu, Mn, Zn, Zr, Ce, Cd, Sn, Sr, Co)	-	-	-	-		10000	-	-	-
S-2618	16712-64-4	ヒドロキシナフトエ酸	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-2622	16881-77-9	ジメトキシ(メチル)シラン	-	予測不能	-	-		2000	-	61°C	-
S-1020	16958-92-2	アジピン酸アルキル(C=1~13)	-	-	-	-		20000	141 °C	509 °C	1.45E-07 mmHg
S-2627	17121-34-5	1,1',1'',1'''-[[[2-hydroxypropyl]imino]bis(ethylenenitrilo)]tetrapropan-2-ol	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-2631	17572-97-3	Tripotassium hydrogen ethylenediaminetetraacetate	-	-	-	-		8000	-	-	-
S-2633	17671-27-1	ベヘン酸(C=22)ベヘニル(C=22)	-	-	-	-		9000	74-75 °C	-	-
S-2634	17831-71-9	3, 6, 9-トリオキサウンデカン-1, 11-ジイル=ジアクリレート	-	-	-	-		2000	-	-	0.000308mmHg
S-2639	18162-48-6	tert-ブチル(クロロ)ジメチルシラン	-	予測不能	-	-		9000	89.5 °C	125°C	-
S-2640	18166-37-5	Silane, triethoxyhexyl-	-	予測不能	-	-		2000	-	-	-
S-2642	18230-61-0	Silane, dimethoxybis(1-methylethyl)-	-	予測不能	-	-		2000	-	-	-
S-0425	18282-10-5	酸化スズ					無機化合物のため計算できない	2000	1630 °C	1800-1900°C	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-2643	18395-30-7	Trimethoxy(2-methylpropyl)silane	-	予測不能	-	-		2000	-	-	-
S-1014	18641-58-2	ペンタエリスリトールアルキルエステル(C5～20)					構造不明のため計算できない	9000	-	-	-
S-1003	18835-33-1	アルケン(C=10～50)	-	-	-	-		40000	-	-	-
S-1003	18835-34-2	アルケン(C=10～50)	-	-	-	-		40000	-	-	-
S-2650	19074-24-9	ビス(2-エタン-1-イルヘキサー1-イル)=ドデカンジオアート	-	-	-	-		4000	-	260-267℃	-
S-0429	19321-40-5	2, 2-ビス[(オレオイルオキシ)メチル]プロパン-1, 3-ジイル=ジオレアート	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-2652	19398-61-9	2, 5-ジクロロトルエン	-	-	-	-		5000	2.5 ℃	200℃	-
S-0430	19438-60-9	4-メチルシクロヘキサン-1, 2-ジカルボン酸無水物	-	-	-	-		2000	-29 ℃	-	5.1mmHg
S-2657	20336-96-3	Lithium myristate	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-0435	20344-49-4	水酸化鉄	-	予測不能	-	-		20000	-	-	-
S-4959	20427-58-1	水酸化亜鉛					無機化合物のため計算できない	1000	-	-	-
S-2664	21142-29-0	3-(triethoxysilyl)propyl methacrylate	-	予測不能	-	-		2000	-	-	-
S-2666	21643-42-5	Tetradecyl acrylate	-	-	-	-		70000	-	-	-
S-0441	21651-19-4	酸化スズ					無機化合物のため計算できない	2000	-	-	-
S-0442	22288-43-3	1,1,3,3-tetramethylbutyl 2-ethylperoxyhexanoate	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-2672	22707-35-3	デカン-1-イル=ヘキサン-1-イル=アジパート	-	-	-	-		20000	-	-	-
S-2676	23288-53-1	炭酸ジルコニル	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2708	25036-19-5	2-Propenoic acid, methyl ester, polymer with ethenylbenzene					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-
S-2740	25105-31-1	硫酸バリウム					無機化合物のため計算できない	40000	-	-	-
S-2758	25168-24-5	2, 2'-[(ジブチルスタニレン)ビス(チオ)]ジ酢酸ジイソオクチル	-	予測不能	予測不能	-*		1000	-	-	-
	25168-24-5		-	-	-	-					
S-2772	25265-15-0	2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-ethylhexyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	60000	-	-	-
S-0473	25354-97-6	2-hexyldecanoic acid	-	-	-	-		100000	-	-	-
S-1003	25378-22-7	アルケン(C=10～50)	-	-	-	-		40000	-	-	-
S-2786	25496-72-4	9-Octadecenoic acid (9Z)-, monoester with 1,2,3-propanetriol	-	-	-	-		10000	25-35 ℃	238-240℃	-
S-2787	25550-51-0	メチルヘキサヒドロ無水フタル酸	-	-	-	-		2000	-29 ℃	290 ℃	1 Pa
S-2805	25685-29-4	2-Propenoic acid, 2-methyl-, ethyl ester, polymer with methyl 2-methyl-2-					構造不明のため計算できない	300000	-	-	-
S-2818	25750-06-5	2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with ethenylbenzene and 2-ethylhexyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-1106	25776-32-3	アクリル酸アルキルエステル・メタクリル酸共重合物					構造不明のため計算できない	4000	-	-	-
S-2860	26221-30-7	Ethanol, 2,2',2''-nitrilotri-, polymer with 2-methyloxirane					構造不明のため計算できない	4000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-1023	26264-06-2	アルキル(C=10~50)ベンゼンスルホン酸塩(Ca, Na, K, Mg, Ba)	-	-	-	-		40000	-	-	-
S-0490	26266-57-9	ソルビタンパルミチン酸モノエステル	-	-	-	-		6000	47℃	-	-
S-1170	26352-63-6	アルキル(C0~4)ベンゼンポリ(n=1~4)カルボン酸・アルキル又はアルケニル(C1~40)ポリ(n=1~6)アルコール重縮合物					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-2879	26399-02-0	2-エチルヘキサノ-1-イル=(Z)-オレアート	-	-	-	-		40000	-	152℃	-
S-0497	26544-38-7	3-(テトラプロペニル)オキサラン-1, 5-ジオン	-	-	-	-		2000	-	180-182℃	-
S-2906	26655-10-7	2-Propenoic acid, 2-methyl-, butyl ester, polymer with ethenylbenzene and 2-ethylhexyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-2908	26657-96-5	プロパン-1, 2, 3-トリオール=モノパルミタート	-	-	-	-		10000	-	-	-
S-0503	26658-19-5	ソルビタン脂肪酸エステル	-	-	-	-		6000	-	>100℃	-
S-1019	26680-54-6	アルケニル(C8~50)無水コハク酸	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-2914	26748-41-4	tert-ブチル=ペルオキシネオデカノアート	-	-	-	-		3000	≤-24℃	-	-
S-2941	27138-31-4	オキシジプロパノールの安息香酸エステル化物	-	-	-	-		1000	-30℃	197℃	-
S-1023	27177-77-1	アルキル(C=10~50)ベンゼンスルホン酸塩(Ca, Na, K, Mg, Ba)	-	-	-	-		40000	-	-	-
S-2948	27215-38-9	Lauric acid, monoester with glycerol	-	-	-	-		10000	-	-	-
S-1012	27253-29-8	脂肪族モノカルボン酸(C=6~28)塩(Pb, Cu, Mn, Zn, Zr, Ce, Cd, Sn, Sr, C	-	予測不能	予測不能	-*		10000	-	-	-
S-2966	27546-07-2	モリブデン酸アンモニウム	-	予測不能	予測不能	-*		2000	-	-	-
S-0516	27610-92-0	2-butyloctanoic acid	-	-	-	-		100000	-	-	-
S-2971	27813-02-1	Methacrylic acid, monoester with propane-1,2-diol	-	-	-	-		2000	-89℃	96℃	0.0221mmHg
S-2980	28040-72-4	2-Propenoic acid, butyl ester, polymer with ethenyl acetate and 2-ethylhexyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	3000	-	-	-
S-1014	28188-24-1	ペンタエリスリトールアルキルエステル(C5~20)	-	-	-	-		9000	>42℃	-	-
S-1019	28777-98-2	アルケニル(C8~50)無水コハク酸	-	-	-	-		2000	70℃	480℃	3.41E-07 mmHg
S-1087	29535-38-4	ポリ(メタクリル酸アルキルエステル)					構造不明のため計算できない	300000	-	-	-
S-0862	29570-58-9	ジペンタエリスリトールヘキサアクリレート	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-3030	29694-85-7	Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with 2-methyloxirane					構造不明のため計算できない	6000	-	-	-
S-3035	29860-47-7	1,3-Propanediol, 2-ethyl-2-(hydroxymethyl)-, polymer with oxirane					構造不明のため計算できない	200000	-	-	-
S-3046	30280-54-7	2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-methyl-2-propenoate, ethyl 2-propenoate and methyl 2-methyl-2-					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-
S-3048	30374-35-7	1,3-Propanediol, 2,2-bis(hydroxymethyl)-, polymer with 2-methyloxirane and oxirane					構造不明のため計算できない	200000	-	-	-
S-1234	30525-89-4	パラホルムアルデヒド					構造不明のため計算できない	20000	120-180℃	-	<1.5mmHg
S-3057	30698-92-1	2-Propenoic acid, butyl ester, polymer with 2-methylpropyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	3000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧
S-3059	30795-23-4	2-Propenoic acid, butyl ester, polymer with ethenylbenzene and 2-ethylhexyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-
S-3060	30795-64-3	2-Propenoic acid, 2-methyl-, dodecyl ester, polymer with methyl 2-methyl-2-propenoate					構造不明のため計算できない	300000	-	-	-
S-3067	31291-60-8	Phenol, bis(1-methylpropyl)-	-	-	-	-		20000	-	-	-
S-0532	31565-37-4	イソトリデシル＝ステアラート	-	-	-	-		9000	-	-	-
S-0536	32360-05-7	メタクリル酸n-オクタデシル	-	-	-	-		30000	15-30 °C	195°C	0.000005mmHg
S-3087	32457-83-3	2-Butenedioic acid (2E)-, polymer with 4,4'-(1-methylethylidene)bis[phenol] and oxirane					構造不明のため計算できない	3000	-	-	-
S-3093	32768-54-0	2, 3-ジクロロトルエン	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-3094	32953-65-4	オクタン-1-イル＝(Z)-オレアート	-	-	-	-		40000	-	160°C	-
S-1021	33053-07-5	脂肪族ジカルボン酸(C=9～13)	-	-	-	-		8000	-	-	-
S-3108	34842-61-0	炭酸ジルコニル					無機化合物のため計算できない	2000	-	-	-
S-3112	35265-04-4	2-[(1-methylpropyl)amino]ethanol	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-4474	36443-68-2	3, 6-ジオキサオクタメチレン＝ビス[3-(3-tert-ブチル-4-ヒドロキシ-5-メチルフェニル)プロピオナート]	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-3134	36521-89-8	ソルビタン脂肪酸エステル	-	-	-	-		6000	-	-	-
S-3139	36631-30-8	Triisodecyl benzene-1,2,4-tricarboxylate	-	-	-	-		9000	-	-	-
S-3142	36878-20-3	ビス(ノナン-1-イルフェニル)アミン	-	-	-	-		2000	-	not determined	-
S-3158	37450-42-3	1,3-Butadiene, 2-chloro-, polymer with sulfur					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-1003	37624-31-0	アルケン(C=10～50)					構造不明のため計算できない	40000	-	-	-
S-3160	37625-93-7	2-Propenoic acid, polymer with 2-(chloromethyl)oxirane and 4,4'-(1-methylethylidene)bis[phenol]					構造不明のため計算できない	5000	-	-	-
S-0552	39255-32-8	Ethyl 2-methylvalerate	-	-	-	-		1000	-	152 - 153 °C	-
S-3184	39454-62-1	Ethanol, 2-butoxy-, phosphate	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-3191	39874-62-9	2-(hydroxymethyl)-2-[(oleoyloxy)methyl]-1,3-propanediyl dioleate	-	-	-	-		1000	-	-	-
S-3201	40704-95-8	2-Propenoic acid, 2-methyl-, 2-hydroxyethyl ester, polymer with 2-ethylhexyl 2-propenoate and methyl 2-ethylhexyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	5000	-	-	-
S-0893	41481-63-4	ビス(4-アリルオキシフェニル)＝スルホン	-	-	-	-		1000	143-145 °C	-	-
S-4492	41481-66-7	2, 2'-ジアリル-4, 4'-スルホニルジフェノール	-	-	-	-		1000	143.05-145.05 °C	-	-
S-3219	42768-15-0	1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 2,2-dimethyl-1,3-propanediol, 1,2-ethanediol and 1,2,3-propanetriol					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-0567	45235-48-1	1-Decanol, 2-octyl-	-	-	-	-		400000	-	-	-
S-3221	45275-74-9	N,N-dimethylicosylamine	-	-	-	-		6000	-	-	-
S-1021	50905-10-7	脂肪族ジカルボン酸(C=9～13)	-	-	-	-		8000	65 - 67 °C	-	-
S-0982	51140-43-3	メタクリル酸アルキル(C=2～20)	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-3236	51240-95-0	1,1,3,3-tetramethylbutyl peroxyneodecanoate	-	-	+	-		3000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-3240	51774-11-9	Isoheptanol	-	-	-	-		400000	-	-	-
S-3244	51952-49-9	イソノニル＝アクリラート	-	-	-	-		70000	-	-	-
S-1087	52496-45-4	ポリ(メタクリル酸アルキルエステル)					構造不明のため計算できない	300000	-	-	-
S-1106	52717-64-3	アクリル酸アルキルエステル・メタクリル酸共重合体					構造不明のため計算できない	4000	-	-	-
S-0574	53306-54-0	1,2-benzenedicarboxylic acid, di-2-propylheptyl ester	-	-	-	-		90000	-	-	-
S-3277	53808-41-6	1,3-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-benzenedicarboxylic acid, 2,2-dimethyl-1,3-propanediol and 2-ethyl-2-(hydroxymethyl)-1,3-propanediol					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-3278	53808-42-7	1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 2,2-dimethyl-1,3-propanediol, 1,2-ethanediol and 2-ethyl-2-(hydroxymethyl)-1,3-propanediol					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-3280	53894-23-8	トリイソノニル＝ベンゼン-1, 2, 4-トリカルボキシラート	-	-	-	-		9000	-	-	-
S-3292	54868-07-4	2-Propenoic acid, polymer with butyl 2-propenoate, 2-ethylhexyl 2-propenoate and ethyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-
S-3300	55818-57-0	Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with 2-(chloromethyl)oxirane, 2-propenoate					構造不明のため計算できない	5000	-	-	-
S-3307	56361-55-8	6, 6'-[プロパン-2, 2-ジイルビス(1, 4-フェニレン)]ビス(3, 6-ジオキサヘキサン-1-イル)＝ジアクリラート	-	-	-	-		1000	-	-	-
S-1046	56927-88-9	メタクリル酸・アクリル酸アルキル(C=2～4)・メタクリル酸アルキル(C=1～4)・メタクリル酸 2-ヒドロキシエチル・スチレン共					構造不明のため計算できない	2000	-	-	-
S-3323	57002-06-9	Dodeca-8,10-dienol	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-3329	57472-68-1	Oxybis(methyl-2,1-ethanediyl) diacrylate	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-1000	57675-44-2	トリメチロールプロパン脂肪族モノカルボン酸(C=6～24)エステル	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-0590	57987-55-0	1,5-Pentanediol, 2,4-diethyl-	-	-	-	-		70000	-	-	-
S-0595	59766-31-3	チタン酸カリウム	-	予測不能	予測不能	-*		7000	-	-	-
S-0861	60506-81-2	ジペンタエリスリトールペンタアクリレート	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-1014	60623-04-3	ペンタエリスリトールアルキルエステル(C5～20)	-	-	-	-		9000	-	-	-
S-3377	61682-73-3	2, 2-ビス[(ドコサノイルオキシ)メチル]プロパン-1, 3-ジイル＝ジドコサノアート	-	-	-	-		4000	84.8-86.2 ℃	-	-
S-3391	61790-48-5	Sulfonic acids (petroleum), barium salts					構造不明のため計算できない	2000	349.84 ℃	935.88 ℃	<1E-010 Pa
S-3392	61790-49-6	Lard, oil, sulfurized					構造不明のため計算できない	5000	-	-	-
S-3405	61970-25-0	Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with 2-(chloromethyl)oxirane, 2-methyl-2-propenoate					構造不明のため計算できない	5000	-	-	-
S-1014	62125-22-8	ペンタエリスリトールアルキルエステル(C5～20)	-	-	-	-		9000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-3417	63164-09-0	2-Propenoic acid, 2-methyl-, dodecyl ester, polymer with methyl 2-methyl-2-propenoate, pentadecyl 2-methyl-2-propenoate, tetradecyl 2-methyl-2-propenoate and tridecyl 2-methyl-2-					構造不明のため計算できない	300000	-	-	-
S-3425	63566-37-0	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxoisooctadecyl)amino]-, inner salt	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-3456	65833-30-9	2-Propenoic acid, 2-methyl-, 1,1'-(1,9-nonanediy) ester	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-3457	65870-97-5	Hexanoic acid, 3,5,5-trimethyl-, 1,1'-[oxybis[2,2-bis[[[(3,5,5-trimethyl-1-oxohexyl)oxy]methyl]-3,1-propanediyl]]					構造不明のため計算できない	1000	-	-	-
S-3464	66085-00-5	Isooctadecanoic acid, monoester with 1,2,3-propanetriol	-	-	-	-		10000	-	-	-
S-3479	67762-40-7	Fatty acids, C10-16, Me esters					構造不明のため計算できない	40000	-	-	-
S-5860	67762-55-4	硫化オレフィン(C8～40)					構造不明のため計算できない	3000	-	>200 ℃	<1E-003 Pa
S-0643	68002-79-9	Fatty acids, C14-18 and C16-18 unsatd., triesters with trimethylolpropane					構造不明のため計算できない	2000	-	-	-
S-3500	68002-80-2	Fatty acids, C14-18 and C16-18-unsatd., potassium salts					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-1014	68130-25-6	ペンタエリスリトールアルキルエステル(C5～20)					構造不明のため計算できない	9000	-	-	-
S-1000	68130-53-0	トリメチロールプロパン脂肪族モノカルボン酸(C=6～24)エステル	-	-	-	-		2000	-	-	-
	68130-53-0		-	-	-	-					
S-3525	68153-37-7	硫化動植物油脂					構造不明のため計算できない	5000	-	-	-
S-3526	68154-27-8	Fatty acids, C14-18 and C16-18-unsatd., ethoxylated propoxylated					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-
S-3542	68227-33-8	2,5,8,11-tetramethyldodec-6-yne-5,8-diol	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-3544	68299-16-1	Tert-pentyl peroxyneodecanoate	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-0659	68299-17-2	Sodium isodecyl sulphate	-	-	+	-		4000	-	-	-
S-3561	68412-86-2	ヒドロキシプロピルエーテル化でん粉(でん粉加水分解物及び酸化でん粉を含む。)					構造不明のため計算できない	40000	-	-	-
S-1014	68441-67-8	ペンタエリスリトールアルキルエステル(C5～20)					構造不明のため計算できない	9000	-	-	-
S-1014	68441-68-9	ペンタエリスリトールアルキルエステル(C5～20)	-	-	-	-		9000	-	-	-
	68441-68-9		-	-	-	-					
S-3581	68443-84-5	Triisononanoic acid, triester with 2,2'-[oxybis(methylene)]bis[2-(hydroxymethyl)propane-1,3-diol] tris(2-ethylhexanoate)					構造不明のため計算できない	1000	-	-	-
S-3588	68515-81-1	Nonanol, branched and linear					構造不明のため計算できない	400000	-	-	-
S-5100	68540-40-9	アルキル(C8～50)ケタール酸塩(Ca, Li, Zn)	-	-	-	-		4000	-	-	-
S-0677	68584-86-1	ヒドロキシプロピルエーテル化でん粉(でん粉加水分解物及び酸化でん粉を含む。)					構造不明のため計算できない	3000	-	-	-
S-3600	68585-47-7	Sulfuric acid, mono-C10-16-alkyl esters, sodium sa					構造不明のため計算できない	4000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧
S-0679	68604-38-6	Fatty acids, C16-18 and C18-unsatd., hexaesters with dipentaerythritol					構造不明のため計算できない	1000	-	-	-
S-3620	68784-31-6	Phosphorodithioic acid, mixed O,O-bis(sec-Bu and 1,3-dimethylbutyl) esters, zinc salts					構造不明のため計算できない	3000	-	-	-
S-3621	68784-34-9	Phosphorodithioic acid, mixed O,O-bis(hexyl and iso-Bu) esters, zinc salts					構造不明のため計算できない	3000	-	-	-
S-1003	68855-58-3	アルケン(C=10~50)					構造不明のため計算できない	40000	-	-	-
S-3626	68860-54-8	Hexaneperoxoic acid, 3,5,5-trimethyl-, 1,1-dimethylpropyl ester	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-3634	68931-30-6	1,6,10,14-Hexadecatetraen-3-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-0987	68955-53-3	モノアルキル(又はアルケニル, C=5~28)アミン					構造不明のため計算できない	4000	-	-	-
S-3655	68990-53-4	Glycerides, C14-22 mono-					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-
S-3656	68991-19-5	硫化動植物油脂					構造不明のため計算できない	5000	-	-	-
S-3730	74812-23-0	Glycols, C16-18					構造不明のため計算できない	70000	-	-	-
S-3737	77496-02-7	2-Propenoic acid, polymer with butyl 2-propenoate, ethenylbenzene and 2-ethylhexyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	7000	-	-	-
S-0711	78683-74-6	2,5-Furandione, dihydro-3-(pentapropenyl)-	-	-	-	-		2000	-	-	-
S-3766	84852-05-1	1,2-Benzenedicarboxylic acid, C8-13-branched and linear alkyl esters					構造不明のため計算できない	90000	-	-	-
S-3767	84852-15-3	4-ノニルフェノール(分枝)	-	-	-	-		30000	ca. -8 °C	293-297°C	0.0012mmHg
S-1000	85005-23-8	トリメチロールプロパン脂肪族モノカルボン酸(C=6~24)エステル					構造不明のため計算できない	5000	-	-	-
S-1023	85117-50-6	アルキル(C=10~50)ベンゼンスルホン酸塩(Ca, Na, K, Mg, Ba)					構造不明のため計算できない	20000	-	-	-
S-3775	85586-24-9	Fatty acids, C8-10, tetraesters with pentaerythritol					構造不明のため計算できない	4000	-	-	-
S-0715	85681-68-1	Sulfuric acid, mono(C14-18 and C16-18-unsatd. alkyl) esters, sodium salts					構造不明のため計算できない	4000	-	-	-
S-3785	87321-74-2	カリウム=2-エチルヘキサン-1-イル=水素=ホスファート					構造不明のため計算できない	2000	-	-	-
S-3790	89687-00-3	リン酸亜鉛					無機化合物のため計算できない	8000	-	-	-
S-0719	90397-38-9	2-methylpentyl 2-methylvalerate	-	-	-	-		1000	-	-	-
S-0982	90552-02-6	メタクリル酸アルキル(C=2~20)					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-0720	91032-13-2	Fatty acids, C14-18, sodium salts					構造不明のため計算できない	30000	-	-	-
S-3796	91078-95-4	水添動植物油脂					構造不明のため計算できない	7000	-	-	-
S-3799	91744-09-1	Glycerides, C16-18 and C18-unsatd. mono-					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-3803	93410-24-3	2-Propenoic acid, butyl ester, polymer with ethyl 2-propenoate and 2-methoxyethyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	3000	-	-	-
S-0723	93762-73-3	Alcohols, C13-15-branched					構造不明のため計算できない	400000	-	-	-
S-3804	93778-52-0	Tetradecanoic acid, 2-decyl-	-	-	-	-		100000	-	-	-
S-3805	93841-48-6	Isooctadecyl acrylate	-	-	-	-		70000	-	-	-
S-1003	93924-10-8	アルケン(C=10~50)					構造不明のため計算できない	40000	-	-	-
S-3810	93980-59-7	Sorbitan, tridocosanoate	-	-	-	-		6000	-	-	-
S-0982	94247-05-9	メタクリル酸アルキル(C=2~20)	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-0982	94247-06-0	メタクリル酸アルキル(C=2~20)	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-0982	94247-08-2	メタクリル酸アルキル(C=2~20)	-	-	-	-		30000	-	-	-
S-3818	95912-88-2	Fatty acids, C16-18, isotridecyl esters					構造不明のため計算できない	9000	-	-	-
S-3822	97404-33-6	Fatty acids, C16-18, C16-18-alkyl esters					構造不明のため計算できない	9000	-	-	-
S-3826	97553-85-0	Phosphoric acid, octyl ester, branched and linear, potassium salts					構造不明のため計算できない	2000	-	-	-
S-3830	98060-25-4	2-Propenoic acid, polymer with butyl 2-propenoate, 2-ethylhexyl 2-propenoate and methyl 2-propenoate					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-
S-4685	106990-43-6	N, N', 4, 7-テトラキス{4, 6-ビス[N-ブチル-N-(1, 2, 2, 6, 6-ペンタメチル-4-ピペリジル)アミノ]-1, 3, 5-トリアジン-2-イル}-4, 7-ジアザデカン-	-	-	-	-		3000	-	-	-
S-3854	109359-36-6	0	-	-	-	-		70000	-	-	-
S-0733	110225-00-8	1-Dodecanol, 2-hexyl-	-	-	-	-		400000	-	-	-
S-3859	111325-21-4	2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-methyl-2-propenoate, butyl 2-propenoate, ethenylbenzene and octadecyl 2-methyl-2-propenoate					構造不明のため計算できない	9000	-	-	-
S-4066	117344-32-8	4, 4'-(9-フルオレニリデン)ビス[2-(フェノキシ)エタノール]	-	-	+	-		1000	117-120 ℃	-	-
S-3871	117520-84-0	Formaldehyde, polymer with dimethylphenol, 3-methylphenol and 4-methylphenol					構造不明のため計算できない	100000	-	-	-
S-1014	118685-29-3	ペンタエリスリトールアルキルエステル(C5~20)					構造不明のため計算できない	9000	-	-	-
S-1102	119861-35-7	メタクリル酸アルキルエステル・アクリル酸アルキルエステル・アクリル酸・N-アルキロールアクリルアミド共重合物					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-
S-0743	128973-77-3	Undecanol, branched and linear					構造不明のため計算できない	400000	-	-	-
S-1022	148348-12-3	2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-methyl-2-propenoate, butyl 2-propenoate, 2-ethylhexyl 2-propenoate and methyl 2-methyl-2-propenoate	-	-	-	-		5000	-	-	-
S-3920	154064-35-4	2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-methyl-2-propenoate, butyl 2-propenoate, 2-ethylhexyl 2-propenoate and methyl 2-methyl-2-propenoate					構造不明のため計算できない	10000	-	-	-
S-3926	157859-20-6	2-Propenoic acid, tris(1-methylethynyl)snyl ester	-	予測不能	-	-		1000	-	-	-
S-3931	160611-14-3	Alcohols, C5-38					構造不明のため計算できない	400000	-	-	-
S-3937	160994-76-3	1,2,4-Benzenetricarboxylic acid, tri-C4-11-alkyl esters					構造不明のため計算できない	9000	-	-	-

通し番号	CAS	名称	DerekNexus	AdmeWorks	CaseUltra	判定	備考	製造輸入量(t)	融点(℃)	沸点(℃)	蒸気圧
S-0747	161212-34-6	Fatty acids, C9-24, C1-12-alkyl esters					構造不明のため計算できない	40000	-	-	-
S-3981	306769-22-2	Isononanoic acid, mixed tetraesters with 2-ethylhexanoic acid and pentaerythritol					構造不明のため計算できない	4000	-	-	-
S-4001	544708-22-7	2-Propenoic acid, 2-methyl-, C12-16-alkyl esters, polymers with C12-15-isoalkyl methacrylate, isodecyl methacrylate, Me methacrylate, 2-octyldodecyl methacrylate and stearyl methacrylate					構造不明のため計算できない	300000	-	-	-