

平成31年度変異原性試験候補物質

資料4-2

通し番号	Cas番号	化審法官報公示整理番号	物質名	別名	Derek	ADME WORKS	CASE Ultra	判定	優先順位※	選定理由	化審法一般化学物質数量(H27)	試薬入手可否	H31候補	×(理由)
1	1533-78-4	3-3595	5-[ビス(2-アセトキシエチル)アミノ]-2-(2-クロロ-4-ニトロフェニルアゾ)アセトアニリド		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
2	2052-25-7	5-2112	ナトリウム=3-[(1,6-ジヒドロキシ-2-ナフチル)ジアゼニル]-4-ヒドロキシベンゼンスルホナート(別名:モルダント ブラック-9)		+	+	-	+	第2	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
3	2309-94-6	5-2636	ディスパーズ ブルー-183		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	X	×	×	試薬入手困難
4	5261-31-4	5-2402	2-[N-(2-シアノエチル)-4-[(2,6-ジクロロ-4-ニトロフェニル)ジアゼニル]アニル]エチル=アセタート(別名:ディスパーズ オレンジ-30)		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
5	10319-14-9	5-2359	ディスパーズ エロー-64		-	+	+	+	第2	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
6	13170-66-6	3-3754	1,4-シクロヘキサジカルボニル=ジクロリド		+	-	+	+	第2	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	X	×	×	試薬入手困難
7	19800-42-1	5-2401	ディスパーズ オレンジ-29		+	+	-	+	第2	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
8	20217-01-0	3-987	2-[(2,4-ジプロモフェノキシ)メチル]オキシラン		+	-	+	+	第2	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	X	×	×	試薬入手困難
9	31810-89-6	5-2581 5-4799	1,5-ジアミノプロモ-4,8-ジヒドロキシアントラセン-9,10-ジオン(別名:ディスパーズ ブルー-56、ディスパーズ ブルー-59)		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	6,000	×	×	試薬入手困難
10	40292-82-8	2-632	ネオデカン酸クロライド		+	-	+	+	第2	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	6,000	×	×	試薬入手困難
11	40690-89-9	5-2428	ディスパーズオレンジ73		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
12	51868-46-3	3-3718	2'-(2-プロモ-4,6-ジニトロフェニルアゾ)-5'-(ジアリルアミノ)-4'-メトキシアセトアニリド(別名:Disperse Blue 291G)		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
13	52697-38-8	3-3530	2-(2-プロモ-4,6-ジニトロフェニルアゾ)-5-N,N-ジエチルアミノアセトアニリド		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
14	55281-26-0	5-2422	3-[4-[(2,6-ジプロモ-4-ニトロフェニル)ジアゼニル]-N-エチルアニル]プロパンニトリル(別名:ディスパーズオレンジ61)		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
15	56548-64-2	3-3528	2-(2-プロモ-4,6-ジニトロフェニルアゾ)-5-N,N-ジエチルアミノ-4-メトキシアセトアニリド(別名:ディスパーズブルー-291)		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試薬入手困難
16	107761-81-9	4-1665	2,3,4,4'-テトラヒドロキシベンゾフェノンと6-ジアゾ-5-オキソ-5,6-ジヒドロナフタレン-1-スルホン酸とのエステル		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	X	×	×	試薬入手困難
17	117584-16-4	5-6311	3-(2,6-ジクロロ-4-ニトロフェニルアゾ)-1-メチル-2-フェニルインドール		+	+	+	+	第1	H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	X	×	×	試薬入手困難

18	1326-82-5	5-2181	C. I. サルファーブラック1		-	+	+	+		H25構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試験入手困難
19	5281-04-9	5-3244	ピグメントレッド-57-1		+	-	+	+	第2	H26構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	4,000	△	○	
20	5124-25-4	5-2348	ディスパーズエロー-42		+	+	+	+	第1	H26構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000未満	×	×	試験入手困難
21	126-72-7	2-1941 2-1955 2-2188	トリス(2,3-ジブロモプロパン-1-イル)ホスファート		+	+	+	+	第1	H26構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	—	△	△	試験純度94.5%
22	13393-68-5	2-224	2-メチルペンタン-2-イルニヒドロペルオキシド		+	-	+	+	第2	H26構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	1,000	×	×	試験入手困難
23	16096-31-4	2-396 7-1280	ポリ(2~6)ヒドロキシアルカン(C3~10)のグリシジルエーテル又は2-メチルグリシジルエーテル		+	+	+	+	第1	H26構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施	—	×	×	試験入手困難
24	100-35-6	2-172 2-174	N,N-ジエチルアミノエチル-2-クロリド		+	-	+	+	第2	H28構造活性相関総合判定「+」 H28遺伝毒性評価WGにおける文献調査による遺伝毒性評価対象物質(エームス試験なし)	—	×	×	試験入手困難
25	587-98-4	5-1405	アシッド エロー-36		+	-	+	+	第2	H28構造活性相関総合判定「+」 H28遺伝毒性評価WGにおける文献調査による遺伝毒性評価対象物質(エームス試験なし)	—	△	△	試験純度不明
26	15965-99-8	2-2426	[(hexadecyloxy)methyl]oxirane		+	-	+	+	第2	H28構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	3,000	×	×	試験低純度
27	17135-66-9	1-281	硝酸クロム		+	+	予測不能	+	第2	H28構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試験入手困難
28	41642-51-7	5-2626	2-(2,6-ジシアノ-4-ニトロフェニルアゾ)-5-(N,N-ジエチルアミノ)アセトアニリド	ディスパーズ ブルー-165	+	+	予測不能	+	第2	H28構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	×	×	×	試験入手困難
29	70592-80-2	2-198	Amines, C10-16-alkyldimethyl, N-oxides		+	-	+	+	第2	H28構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試験入手困難
30	78851-23-7	2-632	Isooctadecanoyl chloride		+	-	+	+	第2	H28構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	6,000	×	×	試験入手困難
31	96662-24-7	3-4349	3-[N-ベンジル-4-[(4-ニトロフェニル)アゾ]アニリン]プロパニトリル		+	+	+	+	第1	H28構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	×	×	×	試験入手困難
32	53461-82-8	2-1965	ポリオキシアルキレン(C=2~20)ビス[ジ(クロロ又はブromoアルキル)]リン酸エステル	Oxydiethylene tetrakis(2-chloroethyl) bisphosphate	+	+	+	+	第1	H28構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	2,000	×	×	試験入手困難

33	597-32-0	2-2002	モノ(又はジ、トリ)ブロモ(又はクロロ)アルカノール(C2~5)	1, 3-ジクロロ-2-メチルブタン-2-オール	+	+	-	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
34	1873-25-2	2-2002	モノ(又はジ、トリ)ブロモ(又はクロロ)アルカノール(C2~5)	1-クロロブタン-2-オール	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
35	4021-75-4	2-2002	モノ(又はジ、トリ)ブロモ(又はクロロ)アルカノール(C2~5)	2, 3-ジブロモブタン-1-オール	+	+	+	+	第1	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
36	33036-62-3	2-2002	モノ(又はジ、トリ)ブロモ(又はクロロ)アルカノール(C2~5)	4-bromobutan-1-ol	+	+	+	+	第1	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
37	11067-81-5	3-1907	アルキル(C=6~20)ベンゼンスルホン酸	ドデシルベンゼンスルホン酸	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	5,000	×	×	試薬入手困難
38	94-06-4	3-503	モノアルキル(C=3~9)フェノール	4-(ペンタン-2-イル)フェノール	-	+	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	10,000	×	×	試薬入手困難
39	34649-59-7	3-594		[[p-dodecylphenoxy)methyl]oxirane	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
40	94159-62-3	3-594		[[o-nonylphenoxy)methyl]oxirane	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
41	2186-25-6	3-574		Oxirane, [[3-methylphenoxy)methyl]-	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
42	4223-17-0	3-594		2-[(4-オクチルフェノキシ)メチル]オキシラン	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
43	4638-04-4	3-594		2-[(2-アリルフェノキシ)メチル]オキシラン	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
44	6178-32-1	3-594		2-[(4-ノニルフェノキシ)メチル]オキシラン	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
45	25134-08-1	3-62	モノ(〜テトラ)ブロモ(又はクロロ)ベンゼンモノ(又はジ)カルボン酸(又はクロライド、無水物)	ジクロロベンゾイル=クロリド	+	+	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
46	32060-64-3	4-1324	2, 3, 4-トリハイドロキシベンゾフェノンナフトキノン-1, 2-ジアジドスルホン酸(モノ〜トリ)エステル	4-ベンゾイル-3-ヒドロキシ-1, 2-フェニレン=ビス(6-ジアゾ-5, 6-ジヒドロ-5-オキソナフタレン-1-スルホナート)	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	×	×	×	試薬入手困難
47	75578-77-7	4-1324	2, 3, 4-トリハイドロキシベンゾフェノンナフトキノン-1, 2-ジアジドスルホン酸(モノ〜トリ)エステル	3-benzoyl-6-hydroxy-1,2-phenylene bis(6-diazo-5,6-dihydro-5-oxonaphthalene-1-sulphonate)	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	×	×	×	試薬入手困難
48	93965-14-1	4-1324	2, 3, 4-トリハイドロキシベンゾフェノンナフトキノン-1, 2-ジアジドスルホン酸(モノ〜トリ)エステル	4-benzoyl-2-hydroxy-1,3-phenylene bis(6-diazo-5,6-dihydro-5-oxonaphthalene-1-sulphonate)	+	-	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」 平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	×	×	×	試薬入手困難

49	572-93-0	4-704	ジヒドロキシアントラキノン	2,7-ジヒドロキシアントラキノン	+	+	+	+	第1	H29構造活性相関総合判定「+」平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
50	6829-22-7	5-5087	ソルベント レッド-179		-	+	+	+	第2	H29構造活性相関総合判定「+」平成26年委託事業による文献調査の結果、「発がん性情報なし、遺伝毒性情報なし」のうち、化審法一般化学物質数量があるもの	1,000未満	×	×	試薬入手困難
51	1300-71-6	3-521 4-57	ジメチルフェノール							H25候補物質	—	×	×	試薬入手困難
52	8016-60-2	8-484	ぬかろう							H25候補物質	×	×	×	試薬入手困難
53	27458-92-0	2-217	イソトリデカノール							H25候補物質	300,000	×	×	試薬入手困難
54	61788-89-4	8-305	ダイマー酸							H25候補物質	10,000	×	×	試薬入手困難
55	64743-00-6	8-415	酸化ワックス							H25候補物質	1,000未満	×	×	試薬入手困難
56	67762-27-0	2-217	(C-16-18)アルコール	セステアリアルアルコール(別名:C16-18アルコール)						H25候補物質	300,000	×	×	試薬入手困難
57	68425-17-2	11-(4)- 865(安衛 法)	水添コーンシロップ	水添デンプンシロップ加水分解物						H25候補物質	—	×	×	試薬入手困難
58	81782-77-6	2-258	4-メチル-3-デセン-5-オール							H25候補物質 H29において未実施	3,000	×	×	試薬入手困難
59	12656-85-8	5-5190	C. I. ピグメントレッド104							H26評価未確定物質	X	×	×	試薬入手困難
60	15571-58-1	2-2244 2-2307	ビス(2-エチルヘキサノール)ビス(2,2'-[(ジオクタン-1-イルスタンナンジイル)ビス(スルファンジイル)]ジアセテート							H26評価未確定物質	—	×	×	試薬入手困難
61	26401-97-8	2-2244 2-2307	2,2'-[(ジオクチルスタニレン)ビス(チオ)]二酢酸ジイソオクチル							H26評価未確定物質	—	×	×	試薬入手困難
62	32492-61-8	7-1356	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							H26評価未確定物質	3,000	×	×	試薬入手困難
63	89-80-5	3-2398	メントン							H29評価未確定物質	—	×	×	試薬入手困難
64	507-70-0	4-607	ボルネオール							H28評価未確定物質	1,000未満	×	×	試薬入手困難
65	9003-34-3	9-1884	(ポリ)-パラ-ジニトロベンゼン							H29評価未確定物質	X	×	×	試薬入手困難

※ 構造活性相関予測結果によるエームス試験実施のための優先順位の判断
(1) 第1優先順位 3つのプログラム全てで陽性の予測結果が得られた場合
(2) 第2優先順位 2つのプログラムで陽性の予測結果が得られた場合

	Cas番号	化審法官	物質名	別名	Derek	Ultra	Times	判定	優先順位 ※	選定理由	化審法一般化学物質数 量(H27)	試薬入手可否	H31 候補	× (理由)
66	9010-93-9	6-199	スチレン・メタクリル酸・ブタジエン共重合物		+	-	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
67	9010-81-5	6-457	アクリロニトリル・ブタジエン・メタクリル酸共重合物		+	-	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
68	25038-36-2	6-47	エチレン・プロピレン・エチリデンノルボルネン共重合物		-	+	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	低純度
69	25035-98-7	6-85	塩化ビニル・アクリル酸アルキルエステル共重合物		+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
70	56848-61-4	6-85	塩化ビニル・アクリル酸アルキルエステル共重合物		+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
71	50973-35-8	7-1115	フェノールスルホン酸、又はその塩(K, Na, Ca)・ホルマリン重縮合物		+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
72	61792-58-3	7-1115	フェノールスルホン酸、又はその塩(K, Na, Ca)・ホルマリン重縮合物		+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
73	25265-17-2	7-1655	3-アミノメチル-3, 5, 5-トリメチルシクロヘキシルアミン・フェノール・ホルムアルデヒド重縮合物		+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
74	63832-41-7	7-511	ポリ(2~10)オキシアルキレン(C2~4)ビスフェノールAのジグリシジルエーテル		+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
75	9004-57-3	8-186	アルキル(C=1~2)セルロース	Ethylcellulose	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	低純度
76	9003-36-5		Formaldehyde, polymer with 2-(chloromethyl)oxirane and phenol	Formaldehyde, polymer with 2-(chloromethyl)oxirane and phenol	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
77	9038-43-1		Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monoctadecyl ether	Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monoctadecyl ether	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
78	9087-53-0		Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, hexadecyl ether	Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, hexadecyl ether	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
79	26139-75-3		キシレン(又はメシチレン)・ホルムアルデヒド重縮合物	キシレン(又はメシチレン)・ホルムアルデヒド重縮合物	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
80	30499-70-8		1,3-Propanediol, 2-ethyl-2-(hydroxymethyl)-, polymer with 2-(chloromethyl)oxirane	1,3-Propanediol, 2-ethyl-2-(hydroxymethyl)-, polymer with 2-(chloromethyl)oxirane	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		△	△	試薬純度不明 在庫少
81	39443-66-8		Oxirane, 2-(chloromethyl)-, polymer with .alpha.-hydro-omega.-hydroxypoly(oxy-1,2-ethanediyl)	Oxirane, 2-(chloromethyl)-, polymer with .alpha.-hydro-omega.-hydroxypoly(oxy-1,2-ethanediyl)	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		△	△	試薬純度不明 在庫少
82	68002-21-1		1,3,5-Triazine-2,4,6-triamine, polymer with formaldehyde, isobutylated	1,3,5-Triazine-2,4,6-triamine, polymer with formaldehyde, isobutylated	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬低純度
83	68412-01-1		D-Glucitol, reaction products with epichlorohydrin	D-Glucitol, reaction products with epichlorohydrin	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
84	68891-46-3		2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene, 3-carboxy-1-cyano-1-methylpropyl-terminated	2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene, 3-carboxy-1-cyano-1-methylpropyl-terminated	+	-	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬低純度
85	64359-81-5	5-6165	4, 5-ジクロロ-2-n-オクチルイソチアゾル-3-オンシクロヘキシル=ビニル=エーテル	4, 5-ジクロロ-2-n-オクチルイソチアゾル-3-オンシクロヘキシル=ビニル=エーテル	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
86	2182-55-0	3-3687	エーテル		-	+	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
87	105-12-4	3-2751	1, 4-ジニトロベンゼン	1, 4-ジニトロベンゼン	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
88	110-75-8	2-377	2-クロロエチルビニルエーテル	2-クロロエチルビニルエーテル	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
89	121-63-1	3-847 3-3173	ジフェニルオキシド-4, 4'-ジスルホニルクロライド	ジフェニルオキシド-4, 4'-ジスルホニルクロライド	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
90	137-29-1	2-1833	(SP-4-1)-ビス(ジメチルジチオカルバマト-κ(2)S, S')銅(II)	(SP-4-1)-ビス(ジメチルジチオカルバマト-κ(2)S, S')銅(II)	+	予測不能	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		△	△	試薬在庫不明
91	140-95-4	2-1739	ジメチロール尿素	ジメチロール尿素	+	-	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	

92	148-71-0	3-279	2-アミノ-5-N, N-ジエチルアミノトルエン	2-アミノ-5-N, N-ジエチルアミノトルエン	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
93	563-76-8	2-1168	2-プロモプロパノイル=プロミド	2-プロモプロパノイル=プロミド	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
94	598-09-4	2-2403	β-メチルエピクロロヒドリン [別名:1-クロロ-2-メチル-2,3-エポキシプロパン]	β-メチルエピクロロヒドリン [別名:1-クロロ-2-メチル-2,3-エポキシプロパン]	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
95	598-64-1	2-2893	ジメチルアンモニウムジメチルジチオカルバメート	ジメチルアンモニウムジメチルジチオカルバメート	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
96	615-66-7	3-267	アミノクロロアニリン	アミノクロロアニリン	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
97	628-89-7	2-447	2-(2'-クロロエチルオキシ)エチルアルコール	2-(2'-クロロエチルオキシ)エチルアルコール	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
98	831-52-7	9-1116 3-821	ピクラミン酸ナトリウム	ピクラミン酸ナトリウム	-	+	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
99	933-88-0	3-1399 3-2972	2-メチル塩化ベンゾイル	2-メチル塩化ベンゾイル	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
100	1204-28-0	3-1361	無水トリメリ酸クロライド	無水トリメリ酸クロライド	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
101	1484-13-5	5-152	9-ビニルカルバゾール	9-ビニルカルバゾール	-	+	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
102	2163-00-0	2-64 2-66	1,6-ジクロロヘキサン	1,6-ジクロロヘキサン	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
103	3049-71-6	5-5197	ピグメント レッド-178	ピグメント レッド-178	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
104	3089-17-6	5-4074	ジクロロキナクリドン	ジクロロキナクリドン	-	+	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
105	3194-57-8	3-2254	1,2,5,6-テトラプロモシクロオクタン	1,2,5,6-テトラプロモシクロオクタン	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		△	△	試薬高価30万/g 在庫不明
106	4584-46-7	1-215 2-187 9-544	N,N-ジメチルアミノエチル-2-クロリド塩酸塩	N,N-ジメチルアミノエチル-2-クロリド塩酸塩	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		○	○	
107	5045-40-9	5-3184	ピグメント エロー-109	ピグメント エロー-109	-	+	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
108	5280-78-4	4-1081 5-3264	1,4-ビス[1-(ジクロロフェニルアゾ)-2-ヒドロキシ-3-ナフトイルアミノ]クロロベンゼン	1,4-ビス[1-(ジクロロフェニルアゾ)-2-ヒドロキシ-3-ナフトイルアミノ]クロロベンゼン	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
109	6300-07-8	3-2002	4-アミノ-3-メトキシアゾベンゼン-3'-スルホン酸ナトリウム	4-アミノ-3-メトキシアゾベンゼン-3'-スルホン酸ナトリウム	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
110	6358-30-1		8,18-dichloro-5,15-diethyl-5,15-dihydroindolo[3,2-b:3',2'-m]triphenodioxazine	8,18-dichloro-5,15-diethyl-5,15-dihydroindolo[3,2-b:3',2'-m]triphenodioxazine	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
111	6478-04-2	2-462	1-クロロ-3-メルカプト-2-プロパノール	1-クロロ-3-メルカプト-2-プロパノール	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
112	9050-31-1	8-576	ヒドロキシプロピルメチルセルロースフタレート	ヒドロキシプロピルメチルセルロースフタレート	+	-	+	+	第2	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		△	△	試薬高価80万/g 在庫不明
113	9072-62-2		Oxirane, 2-(chloromethyl)-, polymer with .alpha.-hydro-omega.-hydroxypoly[oxy(methyl-1,2-ethanediy)]	Oxirane, 2-(chloromethyl)-, polymer with .alpha.-hydro-omega.-hydroxypoly[oxy(methyl-1,2-ethanediy)]	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
114	12262-58-7	5-666	Cyclohexanone, peroxide	Cyclohexanone, peroxide	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬入手困難
115	13159-52-9	2-1032	メタクリル酸3-クロロ-2ヒドロキシプロピル	メタクリル酸3-クロロ-2ヒドロキシプロピル	+	+	/	+	第1	H30構造活性相関総合判定「+」でエームス試験未実施		×	×	試薬低純度

※ 構造活性相関予測結果によるエームス試験実施のための優先順位の判断

- (1) 第1優先順位 Derek Nexus及びCase Ultraで陽性の予測結果が得られた場合(この場合においてTIMESは使用しない)
(2) 第2優先順位 Derek Nexus又はCase Ultraで陽性の予測結果が得られ、さらにTIMESで陽性の結果が得られた場合