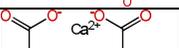
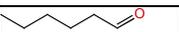
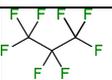
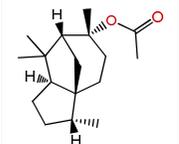


平成25年度構造活性相関の推計結果
(全763物質の1頁目)

資料3-3

CAS	名称	構造式	構造活性相関の推計結果				製造輸 入量(t)	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧	備考 温度:蒸気圧の測定・推定条件 物質名:製造輸用量がまとめて集 計されている場合	Other Source
			Derek Nexus	ADME WORKS	CaseUltra	総合 判定						
62-33-9	Sodium calcium edetate		-	-	-	-	8000	51-54			エチレンジアミン四酢酸塩 (Na, Al, K, Ca, Mg)	
62-54-4	Acetic acid, calcium salt		-	予測不能	予測不能	*-	500	100			酢酸塩 (Na, K, Li, Ca, Al, Mg) としては5000t	化学商品
66-25-1	ヘキサナール		-	-	-	-	30	-56	131	11.3mmHg	25°C アルカナール(C=4~19)として は60000t	化学商品
75-73-0	テトラフルオロメタン		+	-	-	-	<1000	-183.6	-127.8	621000mmHg	25 °C外挿値 フッ化炭素として	
75-91-2	tert-ブチル=ヒドロペルオキシド		+	-	+	+	7000	-8	35	5.48mmHg	25°C t-アルキル(C4~8)ヒドロペルオ キシド	
76-16-4	ヘキサフルオロエタン		-	-	-	-	<1000	-100.05	-78.1	25100mmHg	25 °C外挿値	
76-19-7	オクタフルオロプロパン		-	-	-	-	<1000	-147.7	-76.6	6630mmHg	25 °C外挿値	
77-54-3	8βH セドラン-8-オールアセテート		-	-	-	-					CHRIP物質あり、情報なし、他にも 情報なし	