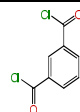
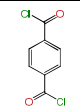
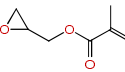
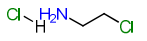
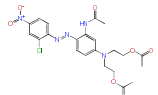
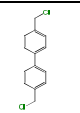
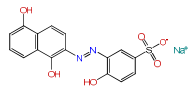
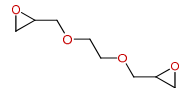
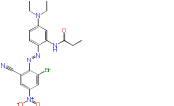
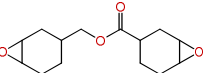
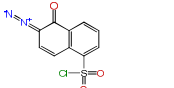
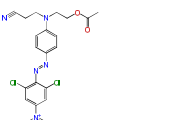
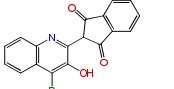
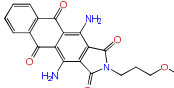
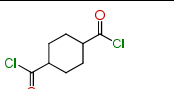
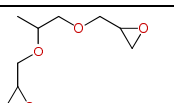
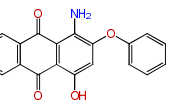
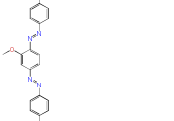
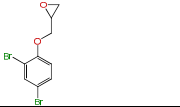
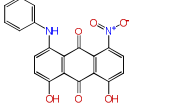
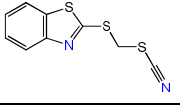
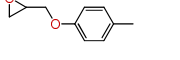
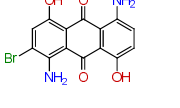
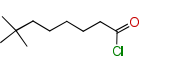
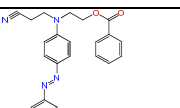
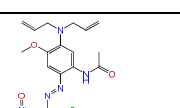
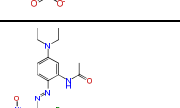


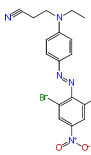
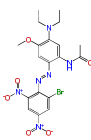
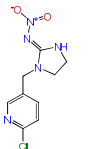
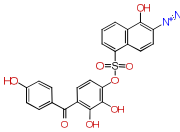
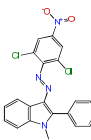
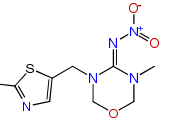
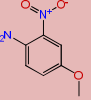
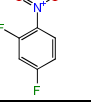
平成25年度構造活性相関の推計結果
(総合判定が+の物質を抜粋)【計39物質】

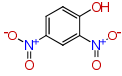
資料3-4

構造活性相関の推計結果														
CAS	名称	構造式	Derek Nexus	ADME WORKS	CaseUltra	総合判定	製造輸入量 (2011年) (t)	主な用途	常温での性状	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧	備考 物質名:製造輸入量がまとめて集計されている場合	Other Source
75-91-2	tert-ブチル=ヒドロペルオキシド		+	-	+	+	7000	樹脂製造用重合剤、硬化剤	液体	-8	35	5.48mmHg (25°C)	tert-アルキル(C4~8)ヒドロペルオキシド	
99-63-8	イソフタル酸ジクロリド		+	-	+	+	2000	耐熱性繊維樹脂原料	固体	43.5	276	0.03mmHg (25°C)		
100-20-9	テレフタル酸クロライド		+	-	+	+	4000	アラミド繊維・合成樹脂・染料・顔料原料	固体	83.5	253	0.02mmHg (25°C)	ベンゼンジカルボン酸クロライド	
106-91-2	オキシラン-2-イルメチル=メタクリレート 別名:メタクリル酸グリシジル		+	-	+	+	5000	熱硬化性塗料・繊維処理剤・イオン交換樹脂・帯電防止剤原料	固体	79	189	0.42 kPa (25°C)		
870-24-6	(2-クロロエチル)アンモニウム=クロリド		+	+	+	+	2社以下のため非公表	有機合成中間体原料	固体	146.3		2.97E-05 mmHg (25°C推定値)		化学商品
1533-78-4	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)アノ]アセトアニリド		+	+	+	+	<1000	染料	固体	127				Chemicalbook
1667-10-3	4, 4'-ビス(クロロメチル)ビフェニル		+	+	+	+	1000	蛍光増白剤・液晶・機能性樹脂中間体	固体	138	184			
2052-25-7	ナトリウム=3-[(1, 5-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		+	+	-	+	<1000	媒染染料	不明		277-282			
2224-15-9	2, 2'-[1, 2-エタンジイルビス(オキシメチレン)]ビス(オキシラン)		+	-	+	+	1000	紙・繊維加工剤、樹脂改質剤、架橋剤	不明		112	0.14 mmHg (25°C)	アルキレングリコールジグリシジルエーテル(C2~12)	

2309-94-6	ディスパーズ ブルー-183		+	+	+	+	2社以下のため非公表	データなし (染料と推測される)	固体		689			lookchem
2386-87-0	3, 4-エポキシシクロヘキシルメチル(3, 4-エポキシ)シクロヘキサンカルボキシレート		+	-	+	+	2000	電気材料・安定剤・塗料原料	液体	-37	188			化学商品
3770-97-6	1, 2-ナフトキノン-2-ジアジド-5-スルホニルクロライド		+	-	+	+	<1000	PS版感光材, フォトレジスト用感光材	固体	132		1.56E-12 mmHg (25°C推定値)		
5261-31-4	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]アニリノ]エチルアセテート 別名: ディスパーズ オレンジ-30		+	+	+	+	<1000	分散染料	固体	133				
10319-14-9	ディスパーズ エロー-64		-	+	+	+	<1000	分散染料	固体	248.6				
12217-80-0	ディスパーズ ブルー-60		-	+	+	+	<1000	データなし	固体		677.5			lookchem
13170-66-6	1, 4-シクロヘキサンジカルボニル=ジクロリド		+	-	+	+	2社以下のため非公表	データなし	液体					CABBchem
16096-30-3	2, 2'-[(1-メチルエチレン)ビス(オキシメチレン)]ビスオキシラン		+	-	+	+	<1000	データなし	不明		275分解		アルキレングリコールジグリシジルエーテル(C2~12)	lookchem
17418-58-5	ディスパーズ レッド-60 別名: 1-アミノ-4-ヒドロキシー-2-フェノキソトラキノン		-	+	+	+	<1000	顔料	固体	183.8		2.1E-12 mmHg (25°C推定値)		
19800-42-1	ディスパーズ オレンジ-29		+	+	-	+	<1000	データなし (染料と推測される)	不明		597.3分解			guidechem

20217-01-0	2-[(2, 4-ジブロモフェノキシ)メチル]オキシラン		+	-	+	+	データなし	エポキシ積層板・フェノール積層板用難燃剤	不明		341			guidechem
20241-76-3	ディスパーズ ブルー-77		+	+	+	+	<1000	分散染料	固体				経済産業省委託試験で Ames陽性, CHL/IU陰性	
21564-17-0	2-[(チオシアナトメチル)スルファニル]-1, 3-ベンゾチアゾール 別名:TCMTB		-	+	+	+	2社以下のため非公表	殺菌剤(失効農薬)	液体	-10	120	0.0525 mmHg	経口発がん性試験実施済み ラット雌で甲状腺腺腫の増加 EPA C (ヒト発がんがあるかもしれない物質)と評価	
26447-14-3	2-[(トリルオキシ)メチル]オキシラン		+	-	+	+	<1000	樹脂改質剤	不明		175-195	2hPa (20°C)		
31810-89-6	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		+	+	+	+	<1000	データなし (染料と推測される)	不明			1.1E-13 mmHg (25°C推定値)		
40292-82-8	ネオデカン酸クロライド		+	-	+	+	4000	医薬・農薬・有機合成原料	液体		209		アルカン酸(C=3~18)クロライド	guidechem
40690-89-9	ディスパーズオレンジ73		+	+	+	+	<1000	分散染料	不明		672.1			lookchem
51868-46-3	2'-(2-ブロモ-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		+	+	+	+	<1000	分散染料	不明		716.2分解			lookchem
52697-38-8	2-(2-ブロモ-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		+	+	+	+	<1000	データなし	固体	184-186				

55281-26-0	3-[4-[(2,6-ジブロモ-4-ニトロフェニル)ジアゼニル]-N-エチルアニリノ]プロパニトリル 別名: ディスパーズオレンジ61		+	+	+	+	<1000	分散染料	固体					lookchem
56548-64-2	2-(2-ブロモ-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		+	+	+	+	<1000	分散染料	不明		700.4			lookchem
105827-78-9	1-[(6'-クロロ-3'-ピリジル)メチル]イミダゾリジン-2-(N-ニトロ)イミン		+	+	-	+	<1000	農薬(殺虫剤)	固体		143.8	1.5E-09mmHg (20°C)		
107761-81-9	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		+	+	+	+	2社以下の ため非公表	データなし	固体		219-222		CHRP物質なし	Advanced Technology & Industrial
117584-16-4	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		+	+	+	+	2012年度 <1000	データなし	不明				CHRP物質あり、情報なし 他も物性情報なし	
153719-23-4	3-[(2-クロロ-1,3-チアゾール-5-イル)メチル]-5-メチル-N-ニトロ-1,3,5-オキサジアジナン-4-イミン 別名: チアメトキサム		+	+	-	+	20.2 (輸入)	農薬(殺虫殺菌剤)	固体		139.1	9.6E-09Pa (25°C)		化学商品
96-96-8	4-メトキシ-2-ニトロアニリン		+	+	+	+	<1000	染料中間体	固体		129	3.19E-04 mmHg (25°C推定値)	アニシジン	※入力ミスが判明 したため、26年度 に再計算を実施 予定
446-35-5	2,4-ジフルオロ-1-ニトロベンゼン		+	+	+	+	2社以下の ため非公表	農薬・医薬・染料中 間体、フッ素化合物 原料	液体		9.8	207	0.254 mmHg (25°C推定値)	

630-08-0	一酸化炭素		+	+	-	+	1000万	鉄鋼製造還元用ガス、合成原料ガス（ホスゲン、メタノール、アンモニア、金属カルボニル等）	気体	-205	-191.5			化学商品
1326-82-5	C. I. サルファーブラック1		-	+	+	+	<1000	染料、顔料	固体		660.3	1.29E-05 mmHg (25°C推定値)		guidechem
29617-66-1	(2S)-2-クロロプロピオン酸		+	-	+	+	<1000	データなし	液体	4	77	4 hPa (60°C)	クロルプロピオン酸	