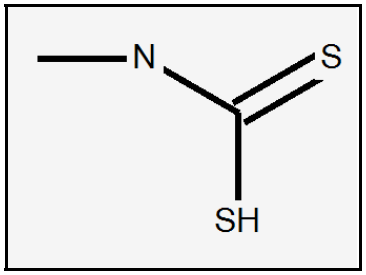
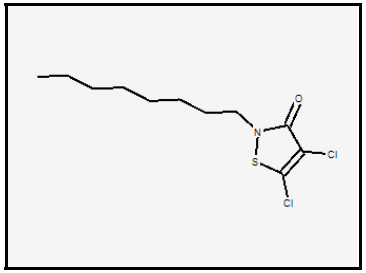
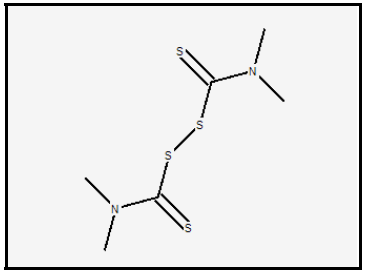
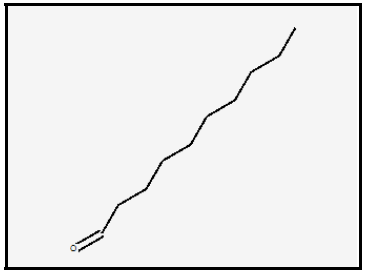
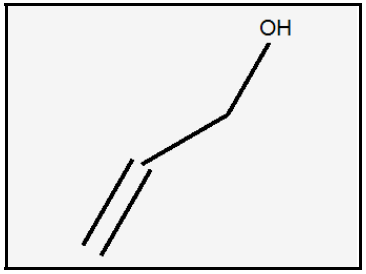
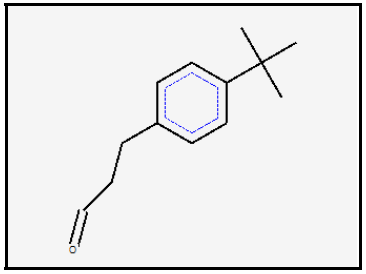
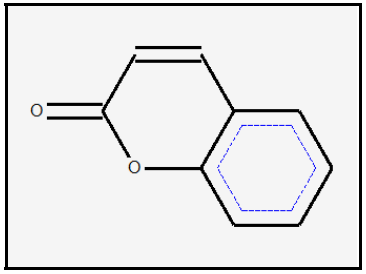
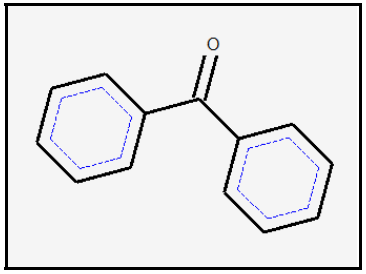
QSAR予測結果　一般化学物質　1．今回新たに有害性クラスの付与を行う物質（候補）

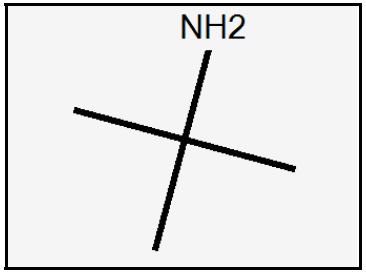
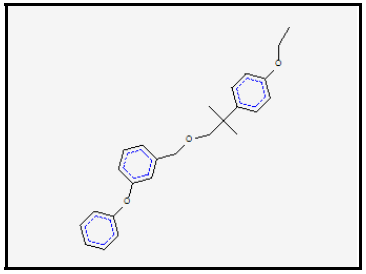
資料4－2参考

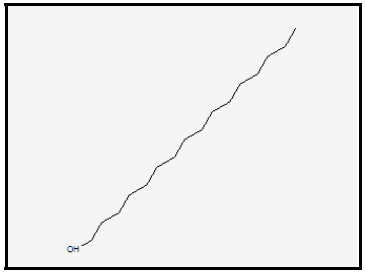
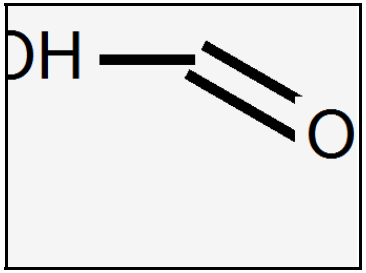
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
30	CAS番号 137-42-8 モノメチルジチオカルバミン酸ナトリウム 備考: NaをHに置換  分子量 107.19 対水溶解(mg/L) [予測値] 440400 ※1 logP(KowWin) 0.48 ※2 logBCFmaxtox 3.58E-1 ※3 LUMO(eV) -4.89E-1～-4.78E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.091 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 777 mg/L 判定不能（minimum toxicity） ----------	使用可 〇Thiocarbamate,Di(free acid) 2.93 mg/L ---------- Baseline Toxicity 2040 mg/L 判定不能（minimum toxicity） ----------	使用不可 barbitals or thiols other 6800 mg/L ※P, ※F;判定不能（logP及び部分構造適用範囲外） ----------
		甲殻類	使用可 0.279 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1520 mg/L 判定不能（minimum toxicity） ----------	使用可 〇Thiocarbamate,Di(free acid) 0.476 mg/L ---------- Baseline Toxicity 1010 mg/L 判定不能（minimum toxicity） ----------	QSARモデルなし
4	旧指定または旧2監61　CAS番号 64359-81-5 4，5－ジクロロ－2－n－オクチルイソチアゾル－3－オン 備考:  分子量 282.23 対水溶解(mg/L) [予測値] 13.37 ※1 logP(KowWin) 3.59 ※2 logBCFmaxtox 2.68E+0 ※3 LUMO(eV) -7.7E-1～-7.08E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.0027 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 5.35 mg/L 判定不能（minimum toxicity） ----------	使用可 〇Thiazolones (Iso-) 0.0510 mg/L ---------- Vinyl/Allyl Halides 1.96 mg/L ---------- Baseline Toxicity 8.65 mg/L 判定不能（minimum toxicity） ----------	使用不可 halides1 1.60 mg/L ※F;判定不能（部分構造適用範囲外） ----------
		甲殻類	使用可 0.00522 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 4.52 mg/L 判定不能（minimum toxicity） ----------	使用可 〇Thiazolones (Iso-) 0.0790 mg/L ---------- Vinyl/Allyl Halides 1.77 mg/L ---------- Baseline Toxicity 5.69 mg/L 判定不能（minimum toxicity） ----------	使用不可 halides1 2.50 mg/L ※F;判定不能（部分構造適用範囲外） ----------

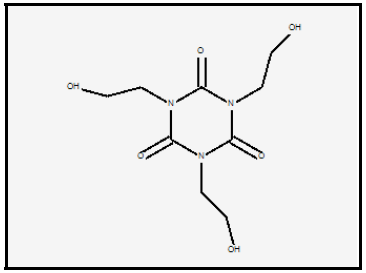
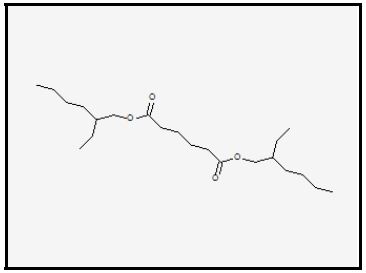
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
5	旧指定または旧2監390, 旧3監177 チウラム CAS番号 137-26-8 備考:  分子量 240.42 対水溶解(mg/L) [予測値] 9064 ※1 logP(KowWin) 1.703 ※2 logBCFmaxtox 1.27E+0 ※3 LUMO(eV) −1.61E+0〜−1.11E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.042 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 110 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Thiocarbamate, Di(Substit) 0.234 mg/L ---------- Baseline Toxicity 365 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 disulfides(ClogP) 7.60 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) ----------
		甲殻類	使用可 0.036 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 181 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Thiocarbamate, Di(Substit) 0.800 mg/L ---------- Baseline Toxicity 202 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 disulfides 14.0 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) ----------
7	1ーデカナール CAS番号 112-31-2 備考:  分子量 156.27 対水溶解(mg/L) [予測値] 60.79 ※1 logP(KowWin) 3.763 ※2 logBCFmaxtox 2.81E+0 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.9E-1〜2.89E-1 ※5 Qc ※6	魚類	使用可 1.45 mg/L	使用可 aldehydes 1.46 mg/L ----------	使用可 ○Aldehydes (Mono) 1.07 mg/L ---------- Baseline Toxicity 3.35 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 aldehydes 1.30 mg/L ----------
		甲殻類	使用可 1.17 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2.65 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Aldehydes (Mono) 0.715 mg/L ---------- Baseline Toxicity 2.24 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 aldehydes 0.990 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ----------

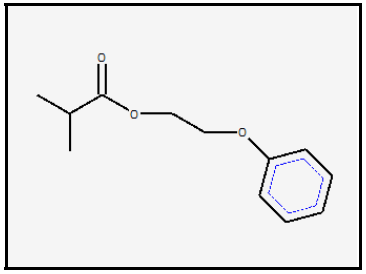
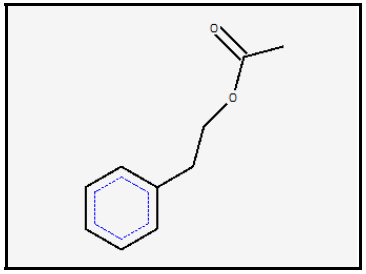
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
8	CAS番号 **107-18-6** Allyl alcohol 備考:  分子量 58.08 対水溶解(mg/L) [予測値] 317700 ※1 logP(KowWin) 0.213 ※2 logBCFmaxtox 1.59E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc 2.22E-3～9.1E-4 ※6	魚類	使用可 0.589 mg/L	使用可 a,b-unsaturated alcohols 3.00 mg/L ----------	使用可 ○Vinyl/Allyl Alcohols 2.08 mg/L ---------- Baseline Toxicity 1920 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 conjugated systems2 7.50 mg/L ----------
		甲殻類	使用可 2.05 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 2140 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Vinyl/Allyl Alcohols 0.250 mg/L ---------- Baseline Toxicity 924 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 conjugated systems2 12.0 mg/L ----------
10	CAS番号 **18127-01-0** 3-(4-tert-butylphenyl)propion aldehyde 備考:  分子量 190.29 対水溶解(mg/L) [予測値] 21.05 ※1 logP(KowWin) 3.943 ※2 logBCFmaxtox 2.94E+0 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI 2.83E-1～2.72E-1 ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用不可 aldehydes 1.68 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 ○Aldehydes (Mono) 1.05 mg/L ---------- Baseline Toxicity 2.82 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 aldehydes 1.30 mg/L ----------
		甲殻類	使用可 1.8 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1.86 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Aldehydes (Mono) 0.641 mg/L ---------- Baseline Toxicity 1.91 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 aldehydes 0.960 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) ----------

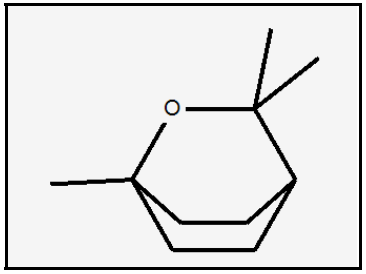
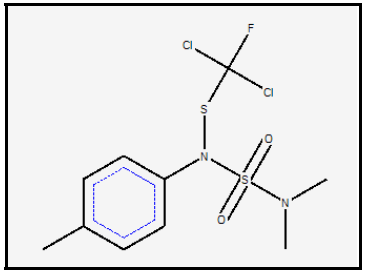
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
13	CAS番号 91-64-5 ベンゾーαーピロン[別名:クマリン] 備考:  分子量 146.15 対水溶解(mg/L) [予測値] 5126 ※1 logP(KowWin) 1.513 ※2 logBCFmaxtox 1.13E+0 ※3 LUMO(eV) -9.31E-1～-9.31E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 127 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 ○Esters 37.6 mg/L Baseline Toxicity 329 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 acrylates 2.10 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
		甲殻類	使用可 30.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 198 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用可 ○Esters 82.4 mg/L Baseline Toxicity 178 mg/L 判定不能(minimum toxicity)	使用不可 acrylates 4.40 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外)
14	CAS番号 119-61-9 ベンゾフェノン 備考:  分子量 182.22 対水溶解(mg/L) [予測値] 103.3 ※1 logP(KowWin) 3.147 ※2 logBCFmaxtox 2.35E+0 ※3 LUMO(eV) -4.63E-1～-3.21E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 10.9 mg/L	使用可 basesurface narcotics 9.01 mg/L	使用可 Neutral Organics 14.0 mg/L	使用可 ○ketones 16.0 mg/L Neutral Organics 19.0 mg/L
		甲殻類	使用可 ＞10 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 8.22 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外)	使用可 Neutral Organics 8.81 mg/L	使用可 Neutral Organics 7.70 mg/L

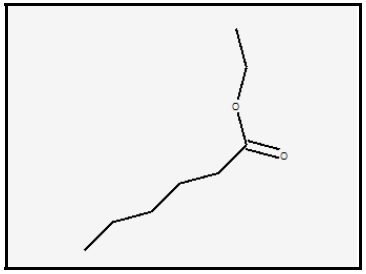
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
15	CAS番号 75-64-9 tert－ブチルアミン 備考: アミン類  分子量 73.14 対水溶解(mg/L) [予測値] 622400 ※1 logP(KowWin) 0.724 ※2 logBCFmaxtox 5.4E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 28 mg/L	使用不可 narcotic amines 128 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 ○Aliphatic Amines 96.9 mg/L ---------- Baseline Toxicity 841 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 primary amines aliphatic 120 mg/L ----------
		甲殻類	使用可 136 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 1760 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Aliphatic Amines 9.96 mg/L ---------- Baseline Toxicity 425 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 primary amines aliphatic 14.0 mg/L ----------
18	旧3監223 CAS番号 80844-07-1 ２－(４－エトキシフェニル)－２－メチルプロピル＝３－フェノキシベンジルエーテル(別名エトフェンプロックス) 備考:  分子量 376.5 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.004075 ※1 logP(KowWin) 7.473 ※2 logBCFmaxtox 4.26E+0 ※3 LUMO(eV) -2.51E-2～2.59E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.0027 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.185 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 Neutral Organics 0.00400 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上) ----------	使用不可 ethers with aromatic 0.00350 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ---------- Neutral Organics 0.00950 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ----------
		甲殻類	使用可 0.00057 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.0762 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 Neutral Organics 0.00400 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上) ----------	使用不可 ethers with aromatic 0.0410 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) ---------- Neutral Organics 0.0230 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			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
20	CAS番号 36653-82-4 1ーヘキサデカンノール 備考:  分子量 242.45 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.1495 ※1 logP(KowWin) 6.734 ※2 logBCFmaxtox 4.51E+0 ※3 LUMO(eV) 3.35E+0～3.53E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 0.4 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 0.261 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 Neutral Organics 0.0110 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上) ----------	使用不可 alcohols aliphatic 0.0400 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ---------- Neutral Organics 0.0250 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ----------
		甲殻類	実測データなし	使用不可 basesurface narcotics 0.0573 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 Neutral Organics 0.0100 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上) ----------	使用不可 alcohols aliphatic 0.150 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ---------- Neutral Organics 0.0450 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ----------
23	CAS番号 590-29-4 Potassium formate 備考: KをHに置換  分子量 46.03 対水溶解(mg/L) [予測値] 817000 ※1 logP(KowWin) -0.461 ※2 logBCFmaxtox -3.44E-1 ※3 LUMO(eV) ※4 ODDI 3.05E-1～3.05E-1 ※5 Qc ※6	魚類	使用可 1560 mg/L	使用不可 aldehydes 47.9 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用不可 Baseline Toxicity 6130 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 acids 4500 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) ----------
		甲殻類	使用可 540 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 7280 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 Baseline Toxicity 2770 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 acids 76.0 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) ----------

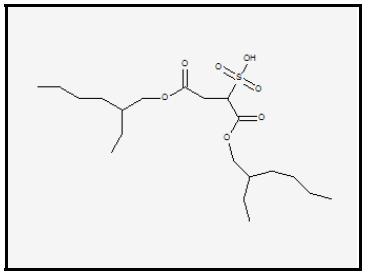
#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
24	CAS番号 **839-90-7** 1，3，5ートリス（2ーヒドロキシエチル）イソシアヌル酸 備考:  分子量 261.24 対水溶解(mg/L) [予測値] 17790 ※1 logP(KowWin) 0.071 ※2 logBCFmaxtox 5.33E-2 ※3 LUMO(eV) -6.84E-1～-5.45E-2 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 100 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 3750 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Triazines, Aromatic 6030 mg/L ---------- Baseline Toxicity 11600 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 amides or imides 2100 mg/L ----------
		甲殻類	使用可 > 1000 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 8500 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Triazines, Aromatic 931 mg/L ---------- Baseline Toxicity 5500 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 amides or imides 1900 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) ----------
25	CAS番号 **103-23-1** Bis(2-ethylhexyl) adipate 備考:  分子量 370.58 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.0005452 ※1 logP(KowWin) 8.115 ※2 logBCFmaxtox 3.85E+0 ※3 LUMO(eV) 1.03E+0～1.14E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 > 50 mg/L	使用不可 esters 0.801 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 ○Esters 0.0130 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上) ---------- Baseline Toxicity 0.000980 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 esters aliphatic 0.00510 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ----------
		甲殻類	使用可 > 0.0032 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.324 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Esters 0.0140 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上) ---------- Baseline Toxicity 0.000979 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 esters aliphatic 0.00510 mg/L ※P;判定不能(logP適用範囲外) ----------

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
26	CAS番号 103-60-6 2-phenoxyethyl isobutyrate 備考:  分子量 208.26 対水溶解(mg/L) [予測値] 105.7 ※1 logP(KowWin) 3.014 ※2 logBCFmaxtox 2.25E+0 ※3 LUMO(eV) 4.82E-2～6.18E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 1.36 mg/L	使用不可 esters 7.19 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 ○Esters 7.12 mg/L ---------- Baseline Toxicity 21.0 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 esters aromatic 8.50 mg/L ※f;判定留意(麻酔作用を持つ部分構造を含む) ----------
		甲殻類	使用可 24 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 14.3 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Esters 13.3 mg/L ---------- Baseline Toxicity 13.1 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 esters aromatic 22.0 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外) ----------
27	CAS番号 103-45-7 Phenethyl acetate 備考:  分子量 164.21 対水溶解(mg/L) [予測値] 1530 ※1 logP(KowWin) 2.572 ※2 logBCFmaxtox 1.92E+0 ※3 LUMO(eV) 1.35E-1～4.81E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	実測データなし	使用不可 esters 11.4 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 ○Esters 10.2 mg/L ---------- Baseline Toxicity 41.3 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 esters aromatic 11.0 mg/L ----------
		甲殻類	使用可 36.6 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 30.0 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Esters 19.9 mg/L ---------- Baseline Toxicity 24.7 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 esters aromatic 28.0 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			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
28	CAS番号 470-82-6 1，3，3ートリメチルー2ーオキサビシクロ[2，2，2]オクタン 備考:  分子量 154.25 対水溶解(mg/L) [予測値] 332.1 ※1 logP(KowWin) 3.133 ※2 logBCFmaxtox 2.34E+0 ※3 LUMO(eV) 2.85E+0～2.85E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 57 mg/L	使用可 basesurface narcotics 31.6 mg/L ----------	使用可 Neutral Organics 12.2 mg/L ----------	使用可 Oethers aliphatic 46.0 mg/L ---------- Neutral Organics 17.0 mg/L ----------
		甲殻類	使用可 200 mg/L	使用不可 basesurface narcotics 17.1 mg/L ※D;判定不能(適用範囲外) ----------	使用可 Neutral Organics 7.67 mg/L ----------	使用可 Neutral Organics 6.70 mg/L ----------
29	旧指定または旧2監892，旧3監56 CAS番号 731-27-1 N－{[ジクロロ(フルオロ)メチル]スルファニル}－N'，N'－ジメチルーN－p－トリルスルファミド 備考:  分子量 347.25 対水溶解(mg/L) [予測値] 3.006 ※1 logP(KowWin) 3.265 ※2 logBCFmaxtox 2.44E+0 ※3 LUMO(eV) -1.39E+0～-1.29E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 0.0175 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.32 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 Baseline Toxicity 20.8 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 amines aromatic or phenols5 13.0 mg/L ※F;判定不能(部分構造適用範囲外) ----------
		甲殻類	使用可 0.19 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 9.52 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 Baseline Toxicity 13.3 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 amines aromatic or phenols5 4.70 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			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
31	CAS番号 123-66-0 Ethyl hexanoate 備考:  分子量 144.22 対水溶解(mg/L) [予測値] 308.7 ※1 logP(KowWin) 2.829 ※2 logBCFmaxtox 2.11E+0 ※3 LUMO(eV) 1.16E+0～1.23E+0 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 8.94 mg/L	使用可 esters 10.8 mg/L ----------	使用可 ○Esters 6.33 mg/L ---------- Baseline Toxicity 21.4 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 esters aliphatic 7.10 mg/L ----------
		甲殻類	実測データなし	使用不可 Reactive unspecified 19.8 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Esters 12.0 mg/L ---------- Baseline Toxicity 13.1 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 esters aliphatic 8.60 mg/L ----------

QSAR予測結果　一般化学物質　2. 平成22～27年度に有害性クラスの付与を行った物質

#	化学物質	対象	毒性値			
			暫定実測毒性値	TIMES ※7	ECOSAR ※8	KATE ※9
3	CAS番号 577-11-7 スルホコハク酸ジ－２－エチルヘキシルNa塩 備考: NaをHに置換  分子量 422.58 対水溶解(mg/L) [予測値] 0.001227 ※1 logP(KowWin) 6.095 ※2 logBCFmaxtox 4.39E+0 ※3 LUMO(eV) -1.46E+0～-9.12E-1 ※4 ODDI ※5 Qc ※6	魚類	使用可 68 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0817 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Esters-acid 2.29 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上) ---------- Baseline Toxicity 0.0730 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 acids 0.690 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) ----- --------
		甲殻類	使用可 19 mg/L	使用不可 Reactive unspecified 0.0400 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用可 ○Esters-acid 3.07 mg/L ※P;(logP>5, 溶解限度以上) ---------- Baseline Toxicity 0.0600 mg/L 判定不能(minimum toxicity) ----------	使用不可 acids 24.0 mg/L ※P, ※F;判定不能(logP及び部分構造適用範囲外) ----------