

OECD原則に基づく 構造活性相関モデルのバリデーション

BIOWIN5

The logo for NITE, consisting of the lowercase letters "nite" in a bold, blue, sans-serif font.

2006年6月23日
(独)製品評価技術基盤機構
化学物質管理センター

実施体制

本報告書に記載されているバリデーション結果は、第 2 回NITE構造活性相関委員会(2004 年 12 月 16 日)においてレビューが行われた。当委員会の委員を以下に示す。

米澤義堯 (独)産業総合技術研究所化学物質リスク管理研究センター総括研究員 (委員長)

赤松美紀 京都大学大学院農学研究科 助教授

大川秀郎 福山大学生命工学部 教授

茂岡忠義 横浜国立大学大学院環境情報研究院 教授

松尾昌季 摂南大学薬学部 教授

本報告書に関する連絡先

(独)製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター

安全審査課 構造活性相関チーム

櫻谷 (e-mail: sakuratani-yuki@nite.go.jp)

目次

要約	1
1. バリデーシヨンの目的.....	2
2. バリデーシヨンに用いた資料.....	2
3. モデルのキャラクタリゼーション	2
4. 当機構が実施した予測性の評価	6
5. 評価.....	10
参考文献.....	11
付録 1. バリデーシヨンセットとして用いた既存化学物質 200 物質	12

要約

OECD (Q)SAR バリデーション原則に基づき、BIOWIN5 v.4.01 が、未点検既存化学物質の中から難分解性の物質をスクリーニングする使用目的に対し受容可能であるか否かを評価した。本モデルは、OECD301C 試験条件下における化学物質の分解度を予測するものであり当該使用目的に適したエンドポイントを有していた。本モデルは、42 の部分構造及び分子量を記述子とし、直線回帰式により予測がなされる。検討の結果、これらの予測アルゴリズムは、当該使用目的の想定内において科学的妥当性が十分であると判断した。本モデルは一般有機化合物全般に対して使用可能であり当該使用目的に適したものである。1321 物質の試験データを用いた外部バリデーションにおける難分解予測の的中率は 85%、難分解物質の特定率は 77%であり、当該使用目的に対し十分な予測性を有していると判断した。当該使用目的においてはメカニズ的な解釈は必ずしも必要とされないが、本モデルが提供するこれらの情報は当該使用目的に有用であると評価した。これらの結果から、本モデルは当該使用目的に対し受容可能であり、十分効果的に活用できると判断した。

1. バリデーシヨンの目的

化学物質によるヒト健康や環境へのリスクを最小化するため、化学物質審査規制法(化審法)が対象とする 2 万種類以上の未点検既存化学物質においては、科学的根拠に基づいた優先順位による合理的かつ効率的な試験の遂行が求められている。構造活相関委員会では、安全性点検事業において優先的に試験を実施すべき物質を選定するため、既存化学物質名簿の第 2 類から第 5 類に該当する年間製造・輸入量 10t 以上(平成 13 年度実績)の未点検既存化学物質(2220 物質)について、生分解性・生物濃縮性を構造活性相関により評価することを実施項目の一つとしている。評価は、以下の 2 段階で行う。

- ① コンピュータソフトウェアを用いたスクリーニング
- ② 専門家の総合判断による個別物質評価

スクリーニングでは、多様な物質の中から難分解性・高蓄積性の可能性の高い物質を特定し、その結果を基に総合評価を実施する物質の選定を行う。総合評価では、より信頼性の高い評価を与えるため、各物質に対し専門家が総合判断を行う。

本文書では、上記スクリーニングの生分解性評価に使用する構造活性相関モデルとして、生分解性予測ソフトウェアBIOWIN5 v.4.01 が受容可能かどうか、OECD (Q)SARバリデーシヨン原則¹⁾に基づき評価した結果を報告する。

2. バリデーシヨンに用いた資料

BIOWIN5 は、化審法の既存化学物質の生分解性試験データをトレーニングセットとし、US-EPA とSyracuse社が共同開発したソフトウェアであり、インターネット上で、無料でダウンロードすることが可能である²⁾。本ソフトウェアは、US-EPAがTSCAの新規化学物質の審査に活用している。

今回調査に利用した資料は、以下のとおり。

- ソフトウェア本体:BIOWIN v.4.01 (US EPA)
- ソフトウェアに付属しているヘルプファイル
- 原著論文³⁾

3. モデルのキャラクタリゼーション

3-1. エンドポイント

本モデルは、OECDテストガイドライン 301C法⁴⁾の試験条件下における化学物質の分解性を予測するものである。OECD301 法は、化学物質と好気性微生物の混合体を添加した水溶液中において、生化学的学的酸素要求量(BOD)が測定され、4 週間後のBOD分解度が 60%以上となることが、良分解性の基準とされている。本モデルの予測は、この基準において良分解性となる確率が連続変数で出力される。

3-2. アルゴリズム

42 の部分構造及び分子量を記述子とし、下式により予測がなされる。Y_j が 0.5 以上で良分解性、0.5 未満で難分解性と判定される。

$$Y_j = a_0 + a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_n f_n + a_m MW \quad (1)$$

ここで、

- Y_j: 化学物質が良分解性となる確率
- f_n: 化学物質jにおける部分構造nの数
- a_n: 部分構造nの回帰係数
- MW: 分子量
- a_m: 分子量の回帰係数
- a₀: 定数項

全フラグメントとその回帰係数を以下の表に示す。

表 1. BIOWIN5 における予測式の記述子と回帰係数

記述子	回帰係数
Nitroso [-N-N=O]	-0.204532
Aliphatic alcohol [-OH]	0.161139
Aromatic alcohol [-OH]	0.064226
Aliphatic acid [-C(=O)-OH]	0.181163
Aromatic acid [-C(=O)-OH]	0.37697
Aldehyde [-CHO]	0.411394
Ester [-C(=O)-O-C]	0.343735
Amide [-C(=O)-N or -C(=S)-N]	0.126629
Triazine ring (symmetric)	0.116818
Aliphatic chloride [-CL]	0.001088
Aromatic chloride [-CL]	0.006172
Aliphatic bromide [-Br]	0.096749
Aromatic bromide [-Br]	0.166778
Aromatic iodide [-I]	-0.384025
Carbon with 4 single bonds & no hydrogens	0.067617
Aromatic nitro [-NO2]	-0.18759
Aliphatic amine [-NH2 or -NH-]	0.033286
Aromatic amine [-NH2 or -NH-]	-0.157691
Cyanide / Nitriles [-C#N]	0.071654
Sulfonic acid / salt -> aromatic attach	0.022126

Pyridine ring	-0.033494
Aromatic ether [-O-aromatic carbon]	0.19523
Aliphatic ether [C-O-C]	0.00147
Ketone [-C-C(=O)-C-]	0.117739
Tertiary amine	-0.084833
Phosphate ester	0.154711
Azo group [-N=N-]	-0.045873
Carbamate or Thiocarbamate	-0.043478
Fluorine [-F]	0.017378
Aromatic-CH3	0.041461
Aromatic-CH2	-0.055696
Aromatic-CH	-0.009754
Aromatic-H	0.008218
Methyl [-CH3]	0.000411
-CH2- [linear]	0.049416
-CH- [linear]	-0.050672
-CH2- [cyclic]	0.019727
-CH - [cyclic]	0.012444
-C=CH [alkenyl hydrogen]	0.006189
Hydrazine [-N-NH-]	-0.372979
Quaternary amine	-0.009261
Tin [Sn]	0.132328
Molecular Weight Parameter	-0.002975
Equation Constant	0.712141

但し、各物質に対するフラグメント割り当てのルールとして、①同じ原子を異なるフラグメント間に含ませない、②微生物毒性と関連がある4級アミン、ヒドラジン、有機スズは、何回現れても1回として数える、③芳香族ターシャリーアミンでは、芳香族アミンフラグメントが、ターシャリーアミンフラグメントに優先することとなっている。

クロロベンゼン、フェノールの予測例を表 2、表 3 にそれぞれ示す。

表 2. クロロベンゼンの予測

記述子	回帰係数	数量	合計
Ar-Cl	0.006	1	0.006
Ar-H	0.008	5	0.041
MW	-0.003	113	-0.335
定数項			0.712
合計			0.424

難分解

表 3. フェノールの予測

記述子	回帰係数	数量	合計
Ar-OH	0.064	1	0.064
Ar-H	0.008	5	0.041
MW	-0.003	94	-0.280
定数項			0.712
合計			0.537

良分解

3-3. 適応領域

本モデルは、一般有機化合物を対象としており、適応領域の厳格な定義付けはなされていない。

3-4. 適合度、頑健性、予測性

3-4-1. 適合度

化審法既存化学物質安全性点検データ集⁵⁾に記載されている試験データから、OECD301C法によって試験がなされ、構造が確定できる有機化合物(有機金属錯体を含む)589物質が、トレーニングセットとして選択されており、全589物質の物質名、CAS番号、生分解性スコア、予測値は、ソフトウェアのヘルプファイルに記載されている。

トレーニングセットでは、試験期間が28日間、BODが60%以上のものは「1」、60%未満のものは「0」、試験期間が14日間のものでBODが60%以上のものは「1」が、生分解性スコアとして与えられている。3回のBOD測定値をどのように加工し、この基準にあてはめたのかは記載されていない。式1の回帰係数は、これらのスコア値を用いて、PCバージョンのStatistical Analysis System (SAS Institute, Cary, NC, USA)のREG procedureを用いた最小二乗法によって算出されている。

ヘルプファイルに記載されている計算結果を集計すると、トレーニングセットに対する難分解予測的中率は84%(284/337)、良分解予測的中率は80%(201/252)となった。(図1-(a)参照。)相関係数、標準残差は算出されていない。

3-4-2. 頑健性

本バージョンは頑健性の評価はなされていない。

3-4-3. 予測性

化審法既存化学物質安全性点検データ集⁵⁾に記載されている試験データから、OECD301C法によって試験がなされ、構造が確定できる有機化合物(有機金属錯体を含む)のうち、トレーニングセットに使用されていない295物質が、バリデーションセットとして選択されている。トレーニングセットとバリデーションセットの振り分けは、ビジュアルベーシックのスク립トの乱数発生により行われている。

トレーニングセットと同様に、バリデーショナルセットの全 295 物質の物質名、CAS番号は、生分解性スコア、予測値は、ソフトウェア付属のヘルプファイルに記載されている。ヘルプファイルに記載されている計算結果を集計すると、バリデーショナルセットに対する、難分解予測的中率は 84% (135/161)、良分解予測的中率は 78% (105/134) となった。(図 1-(b)参照。)

3-5. メカニズム

本モデルは、メカニズム的な解釈はなされていない。

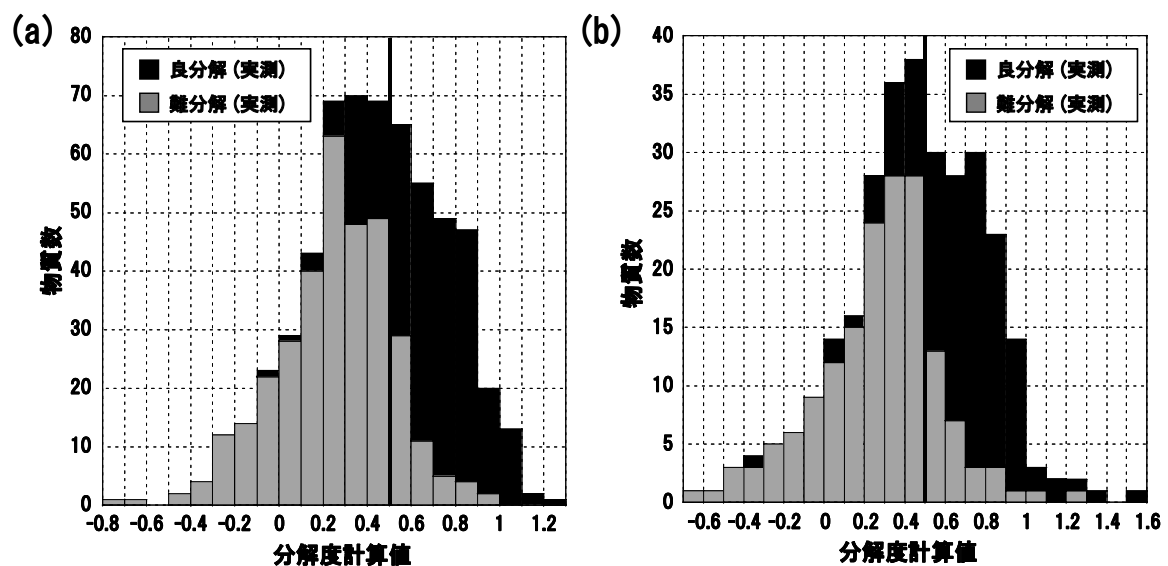


図 1. BIOWIN5 における、分解度計算値に対する実測試験結果のヒストグラム
(a): トレーニングセット 全 589 物質、(b): バリデーショナルセット 全 295 物質

4. 当機構が実施した予測性の評価

4-1. バリデーショナルセット

以下の 2 つのデータセットをバリデーショナルセットとして使用した。

- ① 化審法既存化学物質安全性点検試験データ⁶⁾。第 2 類から第 5 類に該当する有機低分子化合物(混合物を除く)で、BIOWIN5、BIOWIN6、CATABOL、CERIモデルいずれのトレーニングセットに含まれておらず、OECD301C法(4週間)において試験された 200 物質(難分解 121 物質、良分解 79 物質)の試験データを選択。平均分子量は 226。
- ② 平成 13 年度までに届出られた化審法新規化学物質の試験データ。第 2 類から第 5 類に該当する有機低分子化合物(混合物を除く)で、OECD301C 法(4週間)において試験された 1121 物質(難分解 808 物質、良分解 313 物質)を選択した。平均分子量は 289。

4-2. 用語の定義

本文書で使用する用語は以下のように定義した。

難分解性……………BOD 分解度が 60%未満のもの

良分解性……………BOD 分解度が 60%以上のもの

難分解予測的中率……難分解性と予測した物質のうち、実測が難分解性である物質の割合。

良分解予測的中率……良分解性と予測した物質のうち、実測が良分解性である物質の割合。

難分解物質特定率……バリデーショナルセット全体において実測が難分解性である物質のうち、難分解性と予測された物質の割合。

良分解物質特定率……バリデーショナルセット全体において実測が良分解性である物質のうち、良分解性と予測された物質の割合。

4-3. 総合的な予測能力

バリデーショナルセットに含まれる各物質の化学構造を BIOWIN5 に入力し生分解性の予測を行ったところ、既存物質では全ての物質、新規物質では 1103 物質(98%)に対して予測がなされた。付録 1 にバリデーショナルセットのうち既存化学物質の 200 物質について、CAS 番号、名称、化学構造、BOD 分解度実測値、BIOWIN5 による予測値を示す。新規化学物質については公表しない。

また、図 2 に BOD 分解度実測値に対する BOD 分解度計算値のプロットを示す。予測のなされた 1303 物質に対する BOD 分解度実測値と BOD 分解度予測値の相関係数は 0.44 で標準誤差は 8.15%であった。

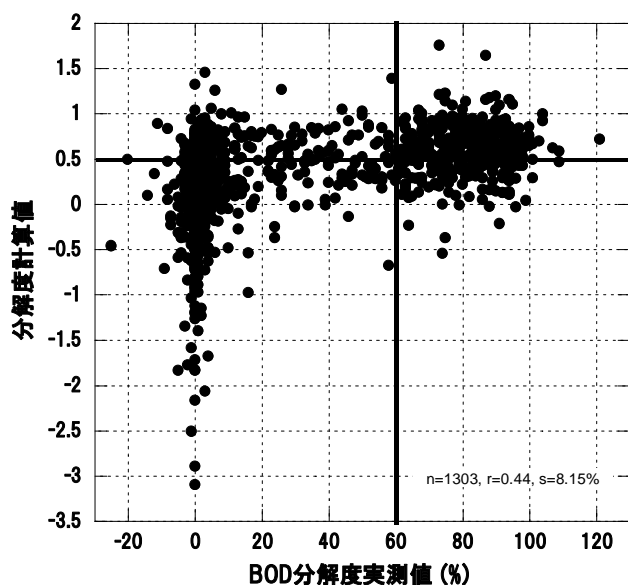


図 2. バリデーショナルセットに対する BOD 分解度実測値と分解度計算値のプロット

4-4. バリデーションセット全体に対する難分解性の予測能力

表4に各物質カテゴリに対する予測結果の集計を表5に的中率と特定率をまとめた。全体として、BIOWIN5が難分解性と予測した844物質のうち715物質(的中率85%)が実測においても難分解性であり、トレーニングセットに含まれる実測が難分解性の929物質のうち715物質(特定率77%)を難分解性と予測した。

表4. 各物質カテゴリに対す BIOWIN5 による予測結果の集計

カテゴリ	予測難分解		予測良分解		予測なし		合計	
	実測 難分解	実測 良分解	実測 難分解	実測 良分解	実測 難分解	実測 良分解	実測 難分解	実測 良分解
全物質	715	129	201	258	13	5	929	392
既存化学物質	76	16	45	63	0	0	121	79
新規化学物質	639	113	156	195	13	5	808	313
2類	77	46	82	143	1	3	160	192
3類	144	31	47	77	3	2	194	110
4類	221	14	27	12	5	0	253	26
5類	273	38	45	26	4	0	322	64
MW<100	9	6	23	20	0	0	32	26
100<MW≤200	165	67	101	132	1	3	267	202
200<MW≤300	216	37	47	62	3	1	266	100
300<MW≤400	133	10	17	27	3	1	153	38
400<MW≤500	92	3	7	12	1	0	100	15
500<MW≤600	38	5	1	0	2	0	41	5
MW>600	62	1	5	5	3	0	70	6
エステル基 あり	106	51	52	131	3	1	161	183
エステル基 なし	609	78	149	127	10	4	768	209
エステル基 2個以上	18	11	14	43	1	0	33	54
エステル基 2個未満	697	118	187	215	12	5	896	338

表5. 各物質カテゴリに対する BIOWIN5 の予測精度

物質カテゴリ	的中率 (%)		特定率 (%)	
	難分解 予測	良分解 予測	難分解 物質	良分解 物質
全物質	85	56	77	66
既存化学物質	83	58	63	80
新規化学物質	85	56	79	62
2類	63	64	48	74
3類	82	62	74	70
4類	94	31	87	46
5類	88	37	85	41
MW<100	60	47	28	77
100<MW≤200	71	57	62	65
200<MW≤300	85	57	81	62
300<MW≤400	93	61	87	71
400<MW≤500	97	63	92	80
500<MW≤600	88	0	93	0
MW>600	98	50	89	83
エステル基 あり	68	72	66	72
エステル基 なし	89	46	79	61
エステル基 2個以上	62	75	55	80
エステル基 2個未満	86	53	78	64

図3に、分解度予測値に対する実測難分解物質数及び実測良分解物質数のヒストグラムを示す。BOD 分解度予測値が小さくなるほど、実測で難分解性の物質の割合が増加した。

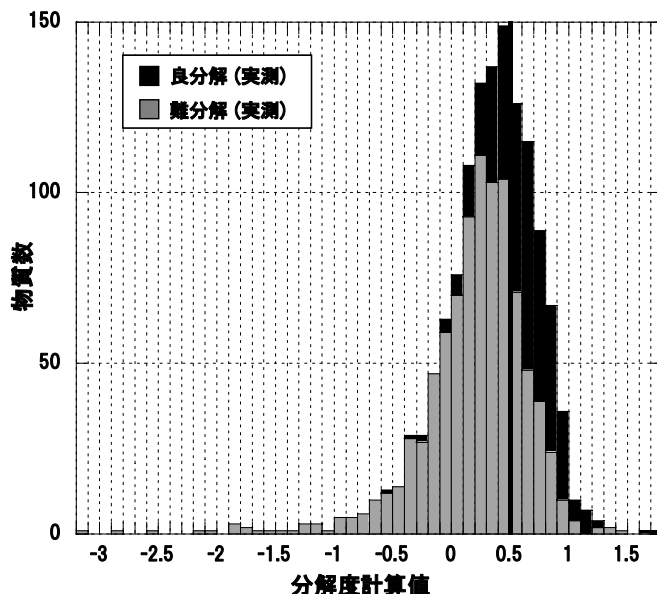


図 3. バリデーショナルセットにおける分解度計算値に対する実測試験結果のヒストグラム

4-5. バリデーショナルセット全体に対する良分解性の予測能力

良分解性の予測能力は、難分解性の予測能力と比較して低く、BIOWIN5 が良分解性と予測した 459 物質のうち 258 物質 (的中率 56%) が実測においても良分解性であり、バリデーショナルセットに含まれる実測が良分解性の 392 物質のうち 258 物質 (特定率 66%) を良分解性と予測した。また、図 3 から見てとれるように、難分解性予測と異なり、BOD 分解度予測値が大きくなっても、実測で良分解性の物質の割合は顕著に増加しなかった。

4-6. 各カテゴリに対する難分解性の予測能力

表 5 に示したように、各類においては、2 類に対する予測性が最も低く、的中率は 63%、特定率は 48% であった。次いで 3 類に対する予測性が低く、的中率は 82%、特定率は 74% であった。4 類・5 類については、的中率・特定率が共に 80% を超えた。

分子量については、低いほど予測性が低く、分子量 100 未満の物質に対する的中率は 60%、特定率は 28%、分子量 100 以上 200 未満の物質に対する的中率は 71%、特定率は 62% であった。分子量が 200 以上のものに対しては、的中率・特定率共に 80% を超えた。

BIOWIN5 は、エステル基の分解性を高めに見積もる傾向があり、エステル基を有する物質の的中率は 68% であった。

4-7. 各カテゴリに対する良分解性の予測能力

表5に示したように、2類、3類に対する的中率は60%程度であり、4類、5類に対する的中率は低く35%程度であった。特定率は実測良分解性の物質の割合が高い2類、3類において高く70%を超えたが、4類、5類では40%程度であった。

分子量では100-500の物質で的中率が約60%、良分解性物質特定率においても明確な分子量依存性はみられなかった。

5. 評価

5-1. エンドポイント

予測エンドポイントについて、BIOWIN5では、OECD301C法による試験条件下における生分解性を予測するとの記述がなされている。BIOWIN5のトレーニングセットは、OECD301C法によって行われた試験データであり、これから予測式の回帰係数が求められるため、本モデルのエンドポイントに対する関連付けはなされており、当該目的に適したエンドポイントを有していると判断する。

5-2. アルゴリズム

本モデルは、直線回帰式により生分解性の予測が行われる。そのアルゴリズムは、明白に示されており、利用者が予測を再現できるものと判断した。また、回帰式に使用されている記述子及び回帰係数をレビューした結果、本モデルの科学的な妥当性は、当該使用目的に対し十分なものであると判断する。

5-3. 適応領域

本モデルは、一般有機化合物を対象としており、適応領域の厳格な定義付けはなされていないが、当該使用目的に対しては差し支えないものと判断する。

5-4. 適合度、頑健性、予測性の評価

内部バリデーションの評価は、的中率のみでなされており、回帰式の評価において、一般的に用いられている相関係数、標準残差、頑健性に対する評価がなされていないが、当該使用目的においては、差し支えないと判断する。報告されている内部バリデーション、外部バリデーションの結果、及び、今回我々が実施した外部バリデーションの結果から、当該使用目的に対し、十分な適合度と予測性を有しているものと判断する。

5-5. メカニズム

本モデルは、メカニズム的な解釈はなされていないが、当該使用目的においては差し支えないものと判断する。

5-6. 結論

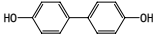
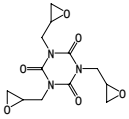
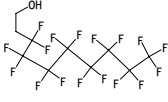

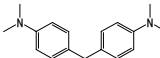
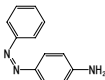
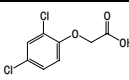
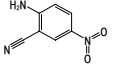
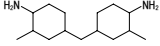
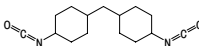
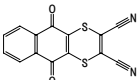
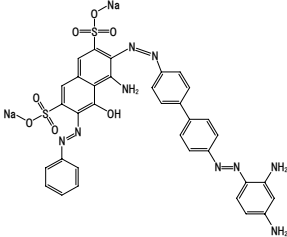
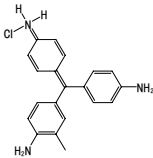
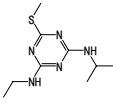
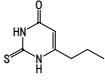
本モデルは、当該使用目的に対し、受容可能であると判断する。

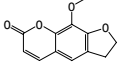
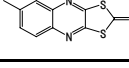
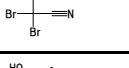
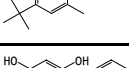
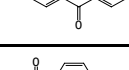
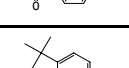
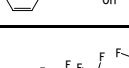

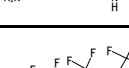
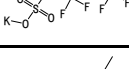
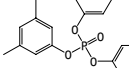
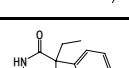
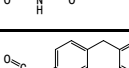
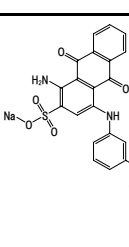
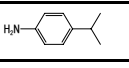
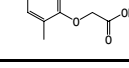
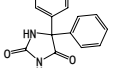
参考文献


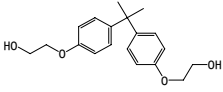
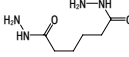
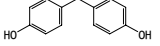
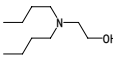
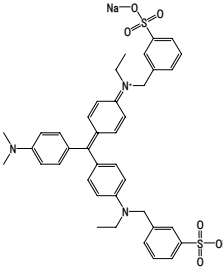
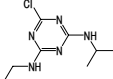
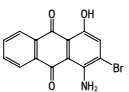

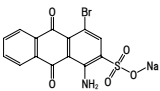

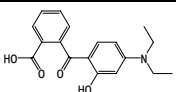
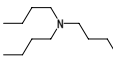

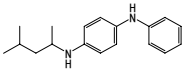

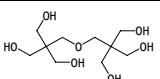

- 1) OECD. (2004). The Report from the Expert Group on (Quantitative) Structure-Activity Relationships [(Q)SARs] on the Principles for the Validation of (Q)SARs. OECD Series on Testing and Assessment Number 49. OECD, Paris.
- 2) <http://www.epa.gov/>
- 3) Tunkel,J., Howard,P.H., Boethling,R.S., Stiteler,W. and Loonen,H. 2000. Predicting Ready Biodegradability in the MITI Test. Environ. Toxicol. Chem. 19:2478-2485.
- 4) OECD. (1982). The Organization for Economic Co-operation and Development Guide Line for Testing of Chemicals. OECD, Paris, Section 301C.
- 5) Chemicals Inspection and Testing Institute. (1992). Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology & Information Center, Tokyo.
- 6) http://www.safe.nite.go.jp/english/kizon/KIZON_start_hazkizon.html

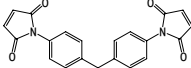

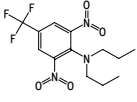
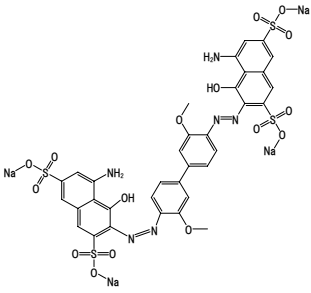
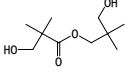

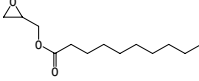
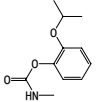
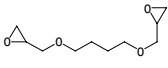


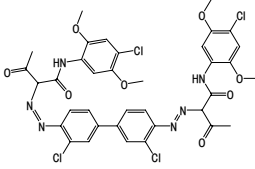
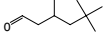
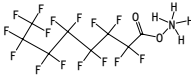


付録1. バリデーションセットとして用いた既存化学物質200物質

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度計算値
1	556-61-6	Methyl Isothiocyanate		-20	0.495
2	3785-34-0	ethylene_bromoacetate		-11	0.887
3	26172-55-4	5-Chloro-2-Methyl-4-Isothiazolin-3-One		-4	0.275
4	12122-67-7	zineb		0	-0.069
5	4098-71-9	3-Isocyanatomethyl-3,5,5-trimethylcyclohexyl_isocyanate		0	0.301
6	57-13-6	Urea		0	0.534
7	122-01-0	4-Chlorobenzoylchloride		0	0.231
8	75-64-9	tert-Butylamine		0	0.597
9	540-84-1	2,2,4-Trimethylpentane		0	0.441
10	75-08-1	Ethyl_mercaptan		0	0.577
11	52-51-7	2-Bromo-2-nitropropane-1,3-diol		0	0.703
12	7299-99-2	hexanoic_acid_2-ethyl-2,2-bis_(2-ethyl-1-oxohexyl)oxy_methyl-1,3-propanediyl_ester		0	1.037
13	83-41-0	1,2-Dimethyl-3-nitrobenzene		0	0.182
14	5329-12-4	2,4,6-Trichlorophenylhydrazine		0	-0.255
15	4286-23-1	Isopropenylphenol		0	0.423
16	88-26-6	2, 6-Di-t-butyl-4-hydroxymethylphenol		0	0.333
17	615-58-7	2,4-Dibromophenol		0	0.385
18	117-08-8	Tetrachlorophthalic anhydride		0	-0.114
19	2840-28-0	3-Amino-4-chlorobenzoic acid		0	0.452
20	2078-54-8	2,6-Diisopropylphenol		0	0.253

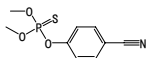
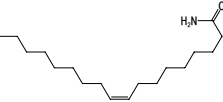
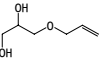
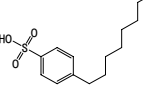



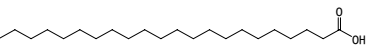
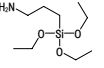
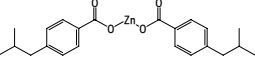

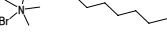
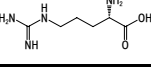

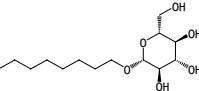
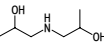
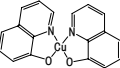



No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度 計算値
21	92-88-6	4,4'-Dihydroxy-diphenyl		0	0.352
22	2451-62-9	1,3,5-Tris(2,3-epoxypropyl)isocyanuric acid		0	0.077
23	678-39-7	2-(Perfluorooctyl)ethanol		0	0.360
24	87-62-7	2,6-Dimethylaniline		0	0.302
25	101-61-1	4,4'-Methylene bis(N,N'-dimethylaniline)		0	-0.203
26	60-09-3	4-(Phenylazo)aniline		0	-0.004
27	94-75-7	2,4-Dichlorophenoxyacetic acid		0	0.517
28	17420-30-3	2-Cyano-4-nitroaniline		0	-0.022
29	6864-37-5	2,2'-Dimethyl-4,4'-methylenebis(cyclohexylamine)		0	0.313
30	5124-30-1	Methylenebis(1,4-cyclohexylene) diisocyanate		0	0.189
31	3347-22-6	2,3-Dicyano-1,4-dithianthraquinone (Dithianon)		0	0.242
32	1937-37-7	4-amino-3-[[[4'-[(2,4-diaminophenyl)azo][1,1'-biphenyl]-4-yl]azo]-5-hydroxy-6-(phenylazo)-2,7-Naphthalenedisulfonic acid, disodium salt		0	-1.837
33	632-99-5	4-((aminophenyl)(4-imino-2,5-cyclohexadien-1-ylidene)methyl)-2-methyl-benzenamine, monohydrochloride (C.I. basic violet 14 magenta)		0	-0.494
34	834-12-8	2-Ethylamino-4-isopropylamino-6-methylthio-s-triazine (Ametryne)		0	-0.162
35	51-52-5	2,3-dihydro-6-propyl-2-thioxo-4(1H)-Pyrimidinone (Propylthiouracil)		0	0.564

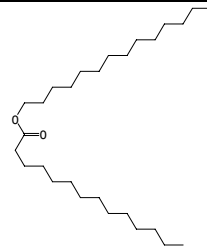

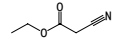
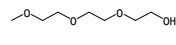

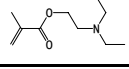

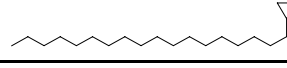
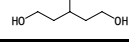
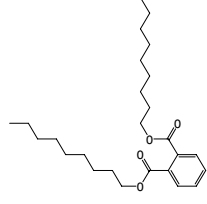
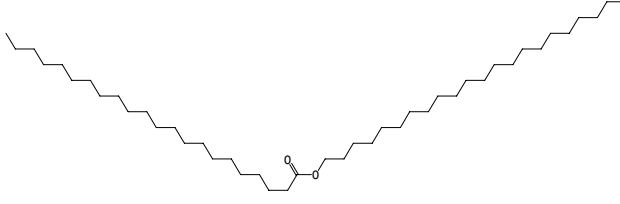
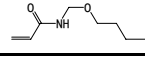
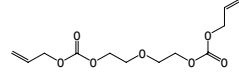
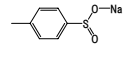
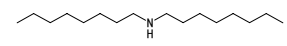

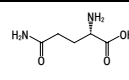
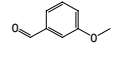
No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度計算値
36	298-81-7	9-methoxy-7H-furo(3,2-g)benzopyran-7-one		0	0.782
37	2439-01-2	Quinomethionate 6-Methyl-1,3-dithiolo[4,5-b]quinoxalin-2-one		0	0.081
38	10222-01-2	2-Cyano-2,2-dibromoacetamide		0	0.452
39	2409-55-4	phenol, 2-(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-		0	0.423
40	131-56-6	methanone, (2,4-dihydroxyphenyl)phenyl-		0	0.387
41	63-74-1	p-Aminosulfonamide		0	0.075
42	599-64-4	4-(1-Methyl-1-phenylethyl)phenol		0	0.287
43	307-70-0	1,1,11-Trihydroperfluoro_undecanol		0	0.245
44	4067-16-7	Pentaethylenhexamine		0	0.715
45	2795-39-3	Perfluorooctane sulfonic acid, potassium salt		0	-0.007
46	25155-23-1	tri(dimethylphenyl)phosphate		0	-0.032
47	50-06-6	5-ethyl-5-phenyl-2,4,6-(1H,3H,5H)pyrimidinetrione		0	0.180
48	101-68-8	4,4'-Diphenylmethane diisocyanate		1	-0.022
49	2580-78-1	Reactive_blue-19		1	-0.971
50	99-88-7	4-Isopropylaniline		1	0.176
51	94-74-6	(4-Chloro-2-methylphenoxy)acetic acid		1	0.613
52	57-41-0	5,5-Diphenyl-2,4-imidazolidinedione (phenytoin)		1	0.111

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度計算値
53	598-09-4	β -Methylepichlorohydrin		1	0.535
54	901-44-0	ethanol, 2,2'-(1-methylethylidene)bis(4,1-phenyleneoxy)_bis-		1	0.815
55	1071-93-8	Adipic dihydrazide		1	0.019
56	620-92-8	4,4'-dihydroxydiphenylmethane		1	0.255
57	102-81-8	2-(Dibutylamino)ethanol		1	0.669
58	1694-09-3	benzenemethanaminium, N-(4-((4-(dimethylamino)phenyl)(4-ethyl((3-sulphophenyl)methyl)amino)phenyl)methylene)-2,5-cyclohexadien-1-ylidene)-N-ethyl-3-sulfo-, hydroxide, inner salt, sodium salt		1	-1.401
59	1912-24-9	2-chloro-4-ethylamino-6-isopropylamino-1,3,5-triazine (Atrazine)		1	-0.122
60	116-82-5	9,10-anthracenedione, 1-amino-2-bromo-4-hydroxy-		1	0.116
61	691-37-2	4-Methyl-1-pentene		1	0.480
62	6258-06-6	1-Amino-4-bromoanthraquinone-2-sulfonic acid sodium		1	-0.117
63	62-55-5	Thioacetamide		1	0.616
64	5809-23-4	benzoic acid, 2-(4-(diethylamino)-2-hydroxybenzoyl)-		1	0.411
65	102-82-9	Tri-n-butylamine		2	0.522
66	115-70-8	2-Amino-2-ethyl-1,3-propanediol		2	0.930
67	793-24-8	N-(1,3-Dimethylbutyl)-N'-phenylparaphenylenediamine		2	-0.379
68	108-99-6	2-methylpyridine		3	0.476
69	126-58-9	Dipentaerythritol		3	1.455
70	106-87-6	1,2-Epoxy-4-(epoxyethyl)cyclohexane		3	0.427



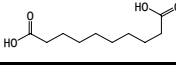

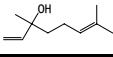
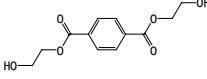
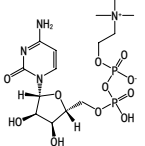

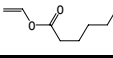
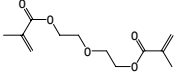
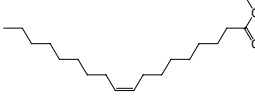


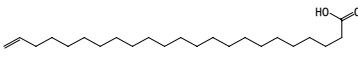



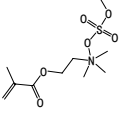

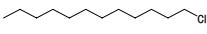

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度 計算値
71	13676-54-5	1,1'-(Methylenedi-4,1-phenylene)bismaleimide		3	-0.319
72	533-74-4	2-Thioxo-3,5-dimethyltetrahydro-2H-1,3,5-thiadiazine		4	0.141
73	1582-09-8	2,6-Dinitro-N,N-dipropyl-4-trifluoromethyl-aniline (Trifluralin)		4	-0.478
74	2429-74-5	3,3'-[(3,3'-dimethoxy[1,1'-biphenyl]-4,4'-diyl)bis(azo)]bis[5-amino-4-hydroxy-2,7-Naphthalenedisulfonic acid, tetrasodium salt		4	-1.680
75	1115-20-4	2,2-Dimethyl-3-hydroxypropyl 2,2-dimethyl-3-hydroxypropionate		5	1.056
76	335-67-1	Perfluorooctanoic acid		5	0.328
77	26761-45-5	neodecanoic acid, 2,3-epoxypropyl ester		5	0.855
78	114-26-1	2-Isopropoxyphenyl-N-methylcarbamate		5	0.225
79	2425-79-8	1,4-Butanediol diglycidyl ether		5	0.477
80	144-54-7	N-Methyldithiocarbamic acid		6	0.334
81	7580-85-0	2-tert-butoxyethanol		6	0.691
82	5567-15-7	Pigment Yellow 83		6	-0.537
83	5435-64-3	3,5,5-Trimethylhexanal		7	0.818
84	3825-26-1	Ammonium pentadecafluorooctanoate		7	0.087
85	89-98-5	Chlorobenzaldehyde		8	0.744
86	2219-82-1	2-(1,1-Dimethylethyl)-6-methyl-phenol		9	0.423


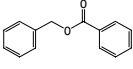

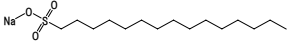

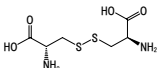
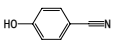
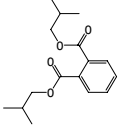

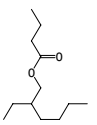
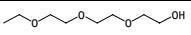


No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度 計算値
87	18375-66-1	n-octadecyl-d-gluconamide		11	1.000
88	40220-08-4	2-Propenoic acid, (2,4,6-trioxo-1,3,5-triazine-1,3,5(2H,4H,6H)-triylo)tri-2,1-eth		12	0.836
89	627-82-7	Diglycerin		13	0.960
90	629-54-9	Hexadecanamide		13	0.771
91	822-06-0	Hexamethylene diisocyanate		14	0.508
92	60-24-2	2-Mercaptoethanol		19	0.740
93	6375-47-9	3-Amino-4-methoxyacetanilide		22	0.366
94	55107-14-7	Methyl pivaloylacetate		23	0.822
95	79-39-0	Methacrylamide		24	0.598
96	87-68-3	hexachlorobutadiene		24	-0.251
97	124-68-5	2-Amino-2-methylpropanol		25	0.759
98	27605-76-1	Probenazole		26	0.149
99	110-78-1	n-Propyl isocyanate		28	0.558
100	140-53-4	(p-Chlorophenyl)acetonitrile		31	0.316
101	7659-86-1	2-Ethylhexylthioglycolate		32	0.695
102	924-42-5	2-propenamide, n-(hydroxymethyl)-		32	0.767
103	1752-30-3	Acetone thiosemicarbazone		33	0.449
104	120-93-4	Ethyleneurea		36	0.496
105	156-87-6	3-Amino-1-propanol		37	0.831
106	3061-75-4	Docosanamide		40	0.817
107	107-11-9	Allylamie		41	0.644
108	124-19-6	n-Nonyl Aldehyde		44	1.047

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度計算値
109	2636-26-2	O-(4-cyanophenyl) O,O-dimethyl phosphorothioate (Cyanophos)		45	0.249
110	301-02-0	Oleamide		46	0.706
111	123-34-2	3-Allyloxy-1,2-propanediol		47	0.759
112	25321-43-1	p-n-Octylbenzene_sulfonic_acid		47	0.204
113	109-64-8	1,3-Dibromopropane		48	0.453
114	66-25-1	hexanal		50	1.024
115	108-23-6	Isopropyl chloroformate		51	0.298
116	112-85-6	Docosanoic acid		52	0.869
117	919-30-2	3-Aminopropyl-triethoxysilane		54	0.385
118	38861-88-0	Zinc_4-isobutylbenzoate		58	-0.682
119	111-30-8	Glutaraldehyde		59	1.385
120	2082-84-0	n-Decyltrimethylammonium bromide		59	0.315
121	74-79-3	L-Arginine		60	0.506
122	107-68-6	N-Methyltaurine		62	0.431
123	29836-26-8	1-O-Octyl-β-D-glucopyranoside		63	0.948
124	110-97-4	di-2-Propanolamine		64	0.670
125	10380-28-6	Copper 8-hydroxyquinolate (Copper-oxinate)		64	-0.236
126	78-97-7	Acetaldehydecyanohydri ne		66	0.683
127	69-65-8	D-Mannitol		67	1.033
128	3006-82-4	tert-butyl=2-ethylperoxyhexate		67	0.285

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度計算値
129	3234-85-3	Myristyl_myristate		67	1.028
130	109-83-1	2-Methylaminoethanol		68	0.782
131	105-56-6	Ethyl cyanoacetate		68	0.890
132	112-35-6	Triethylene glycol monomethyl ether		69	0.686
133	106-94-5	1-Bromopropane		70	0.550
134	105-16-8	2-Diethylaminoethyl methacrylate		70	0.631
135	586-62-9	1,4-Terpinolene		72	0.373
136	19780-16-6	1,2-Epoxyeicosane		73	0.704
137	4457-71-0	3-Methyl-1,5-pentanediol		74	0.830
138	28553-12-0	Bis(7-metyloctyl)=phthalate		74	0.979
139	17671-27-1	Behenyl_behenate		75	1.136
140	1852-16-0	2-propenamide, n-(butoxymethyl)-		76	0.498
141	142-22-3	Allyl Diglycol Carbonate		76	0.231
142	824-79-3	Benzenesulfonic acid, 4-methyl-, sodium salt		76	0.256
143	1120-48-5	Dialkyl (or alkenyl, C 8-24) complex amine Di-n-octylamine		77	0.720
144	598-78-7	2-Chloropropionic acid		77	0.521
145	56-85-9	L-Glutamine		77	0.667
146	591-31-1	m-Methoxybenzaldehyde		78	0.947

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度 計算値
147	105-45-3	Methyl_acetoacetate		78	0.878
148	7620-77-1	Lithium 12-hydroxystearate		78	0.653
149	112-80-1	Oleic_acid		78	0.758
150	111-82-0	Methyl_dodecanoate		78	0.913
151	111-17-1	3,3'-Thiodipropionic acid		78	0.742
152	101-43-9	Cyclohexyl methacrylate		78	0.679
153	6104-30-9	urea_n,n''-(2-methylpropylidene)bis-		78	0.093
154	299-28-5	Calcium_gluconate		79	0.737
155	102-01-2	Acetoacetanilide		79	0.520
156	108-32-7	2-Oxo-4-methyl-1,3-dioxolan		79	0.441
157	110-93-0	6-Methyl-5-hepten-2-one		79	0.561
158	122-03-2	Cuminaldehyde		81	0.707
159	2881-83-6	ethyl p-anisoylacetate		81	0.840
160	89-32-7	1, 2, 4, 5-Benzenetetracarboxylic acid anhydride		82	0.080
161	143-28-2	9-Octadecen-1-ol		82	0.829
162	822-16-2	Sodium_stearate		83	0.592
163	7360-38-5	propane-1,2,3-triyl 2-ethylhexanoate		85	0.835
164	556-52-5	2,3-Epoxy-1-propanol		85	0.736
165	1338-41-6	Sorbitan_monooctadecan oate		88	1.170
166	97-88-1	n-Butyl_methacrylate		88	0.794

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度計算値
167	84-66-2	Diethyl_phthalate		88	0.871
168	688-84-6	2-Ethylhexyl_methacrylate		88	0.676
169	111-20-6	1,8-Octanedicarboxylic acid		89	0.868
170	623-33-6	Ethyl_glycinate_hydrochloride		89	0.731
171	78-70-6	3,7-Dimethyl-1,6-octadien-3-ol		90	0.446
172	959-26-2	1,4-benzenedicarboxylic acid, bis(2-hydroxyethyl) ester		90	1.196
173	987-78-0	Cytidine-5'-diphosphocholine		91	-0.221
174	105-67-9	2,4-dimethylphenol		91	0.521
175	3050-69-9	Vinyl_n-hexanoate		91	0.850
176	2358-84-1	Diethylene glycol dimethacrylate		91	0.904
177	112-62-9	Oleic acid methyl ester		91	0.879
178	107-10-8	n-Propylamine		92	0.669
179	112-82-3	1-bromohexadecane		92	0.642
180	65119-95-1	22-Tricosenoic acid		93	0.851
181	107-83-5	2-Methylpentane		93	0.505
182	105-38-4	Vinyl propionate		93	0.826
183	123-08-0	p-Hydroxybenzaldehyde		94	0.857
184	6891-44-7	[2-(Methacryloyloxy)ethyl]trimethylammonium methyl sulfate		94	0.317
185	21368-68-3	DL-Camphor		94	0.585
186	112-52-7	1-Chlorododecane		95	0.648
187	1120-71-4	1,2-Oxathiolane 2,2-dioxide (1,3-Propane Sultone)		95	0.408

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	分解度 計算値
188	107-19-7	2-Propyn-1-ol		95	0.756
189	120-51-4	Benzyl_benzoate		96	0.451
190	584-03-2	1,2-Butanediol		96	0.815
191	5896-54-8	Sodium_1-pentadecanesulfonate		96	0.534
192	104-87-0	Tolylaldehyde		97	0.840
193	56-89-3	L-Cystine		98	0.424
194	767-00-0	Paraoxybenzonitrile		98	0.527
195	84-69-5	Diisobutyl Phthalate		98	0.604
196	5726-19-2	2-Methylcyclohexyl acetate		99	0.696
197	25415-84-3	2-Ethylhexyl=butylate		100	0.756
198	112-50-5	Triethylene glycol monoethyl ether		103	0.694
199	75-21-8	Ethylene_oxide		107	0.622
200	106-88-7	1,2-Epoxybutane		109	0.581