

1/9

Fig.1

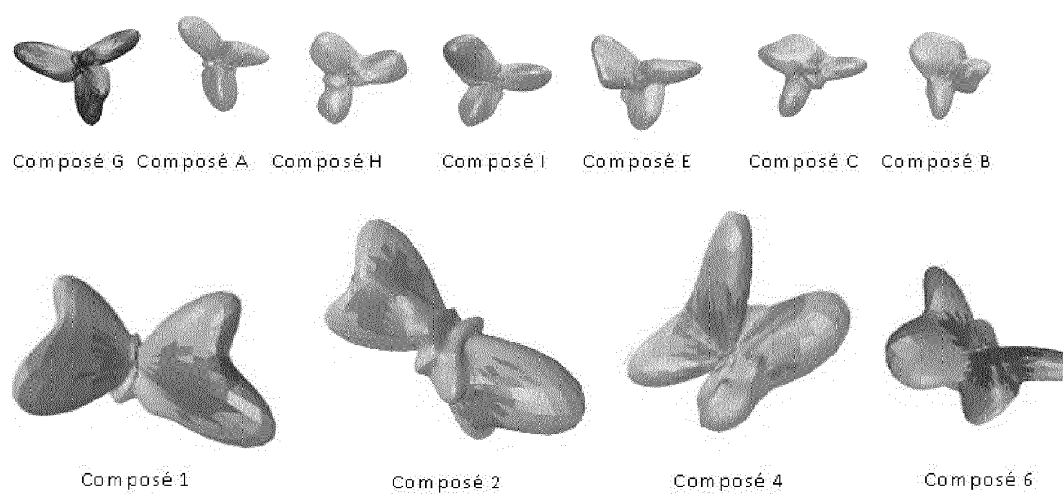
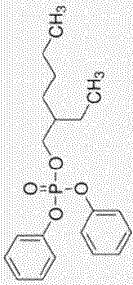
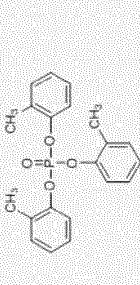
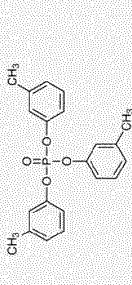
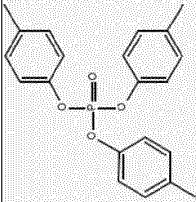
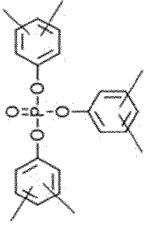
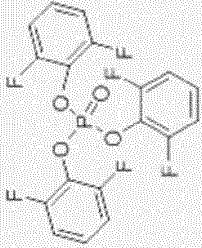


Fig. 2

Composé	Données officielles ECHA	IC ₅₀ hAChE (mg/L)	IC ₅₀ eqBuChE (mg/L)	Cluster harmoniques sphériques	QSAR neuro-toxicité (%)	QSAR repro-toxicité (%)	Niveau de risque	Structures chimiques
Exemples comparatifs								
Composé A	Non CMR, pas de toxicité aiguë	12,7	0,7	Cluster 1	0,39	1,93	4	
Composé B	Non enregistré	15	3,7	Cluster 1	7,35	6,28	5	
Composé C	Non enregistré	9,3	2,3	Cluster 1	6,99	3,69	5	

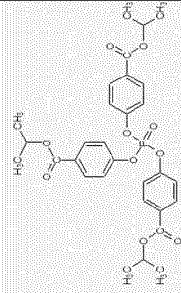
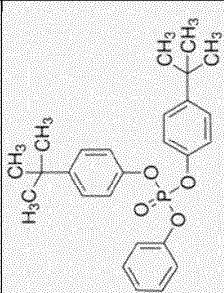
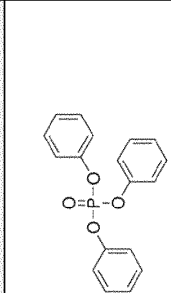
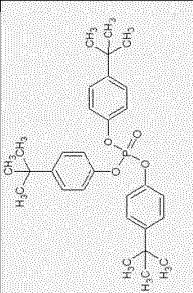
3/9

Fig.3

Composé	Données officielles ECHA	IC ₅₀ hAChE (mg/L)	IC ₅₀ eqBuChE (mg/L)	Cluster harmoniques	QSAR neuro-toxicité (%)	QSAR repro-toxicité (%)	Niveau de risque	Structures chimiques
Composé D	Non enregistré	9,7	42,7	Cluster 1	8,36	0,74	3	
Composé P	PBT en évaluation* Reprotoxique (Cat 2; H361)	16,9	0,7	Cluster 1	Oui	Oui	4	Mélange d'isomères tricrésylphosphate (Durad 125)
Composé E	PBT en évaluation* Reprotoxique (Cat 1b, H360f)	ND	ND	Cluster 1	2,23	1,41	≥2	
Composé F	Non enregistré	5,6	8,7	Cluster 1	ND	ND	≥3	

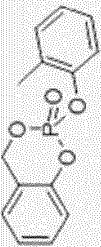
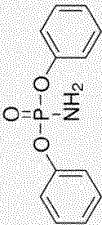
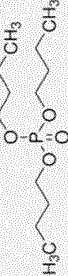
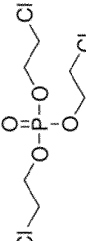
4/9

Fig.4

Composé	Données officielles ECHA	IC ₅₀ hAChE (mg/L)	IC ₅₀ eqBuChE (mg/L)	Cluster harmoniques sphériques	QSAR neuro-toxicité (%)	QSAR repro-toxicité (%)	Niveau de risque	Structures chimiques
Composé G	Non enregistré	15,8	145,5	Cluster 1	0,05	5,56	2	
Composé H	Non enregistré	12,1	122,8	Cluster 1	0,02	3,49	3	
Composé I1	Non CMR, pas de toxicité aiguë	10,8	14,0	Cluster 1	1,01	1,22	4	
Composé I2	Non enregistré	8,4	96	Cluster 1	0,32	1,74	3	

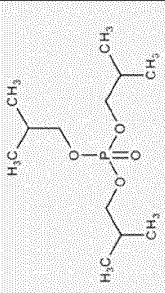
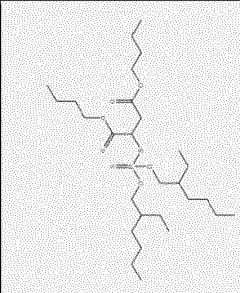
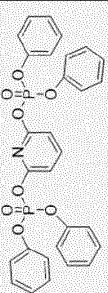
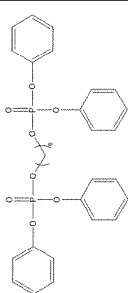
5/9

Fig.5

Composé	Données officielles ECHA	IC ₅₀ hAChE (mg/L)	IC ₅₀ eqBuChE (mg/L)	Cluster harmoniques sphériques	QSAR neuro-toxicité (%)	QSAR repro-toxicité (%)	Niveau de risque	Structures chimiques
Composé I3	Non CMR, pas de toxicité aiguë	13,9	34,9	Cluster 1	NA : Mélange de composés neurotoxiques	-	≥3	Mélange de dérivés de I1
Composé J	Non enregistré	ND	0,7	Cluster 2	5,61	1,67	≥3	
Composé K	Non enregistré	9,5	33,9	Cluster 2	1,13	4,4	4	
Composé L	Non CMR, pas de toxicité aiguë	12,2	121	Cluster 5	0	0,26	2	
Composé M	Cancérigène Cat 3; R40 (GHS: Cat. 2, H 341)	7,9	21	Cluster 5	9,98	0,23	3	
Composé N	Cancérigène Reprotoxique	8,2	89,8	Cluster 5	0,59	29,8	4	

6/9

Fig.6

Composé	Données officielles ECHA	IC ₅₀ hAChE (mg/L)	IC ₅₀ eqBuChE (mg/L)	Cluster harmoniques sphériques	QSAR neuro-toxicité (%)	QSAR repro-toxicité (%)	Niveau de risque	Structures chimiques
Composé Q	Non CMR, pas de toxicité aiguë	9,4	12,8	Cluster 5	26,31	1,82	4	
Composé R	Non CMR, pas de toxicité aiguë	19,3	11,1	ND	ND	ND	≥1	
Composé S	Non enregistré	2,9	0,01	Cluster 3	0,32	0,04	3	
Composé U	Non enregistré	21,6	1,2	ND	ND	ND	≥1	

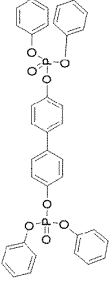
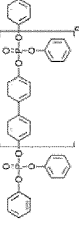
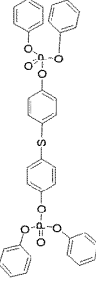
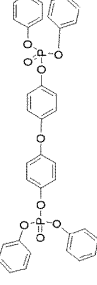
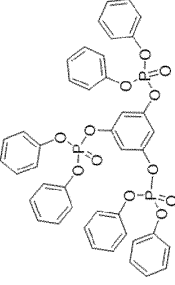
7/9

Fig. 7

Composé	Données officielles ECHA	IC ₅₀ hAChE (mg/L)	IC ₅₀ eqBuChE (mg/L)	Cluster harmoniques sphériques	QSAR neuro-toxicité (%)	QSAR repro-toxicité (%)	Niveau de risque	Structures chimiques
Composé T	Non enregistré	17,8	1,8	Cluster 3	0,02	0,1	1	
Composé V	Non enregistré	23,8	1,3	ND	ND	ND	≥ 1	
Composé W	Non CMR, pas de toxicité aiguë	ND	ND	Cluster 4	91	0,19	≥ 2	
Composés selon l'invention								
Composé 1	ND	24,1	107	Cluster 3	0,09	0,08	0	

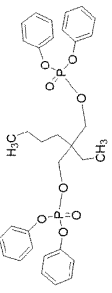
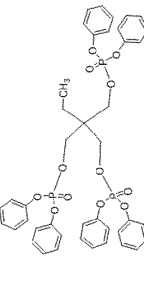
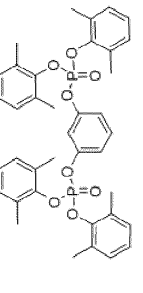
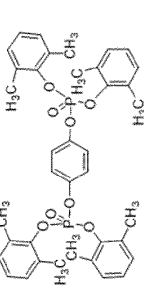
8/9

Fig.8

Composé	Données officielles ECHA	IC ₅₀ hAChE (mg/L)	IC ₅₀ eqBuChE (mg/L)	Cluster harmoniques sphériques	QSAR neuro-toxicité (%)	QSAR repro-toxicité (%)	Niveau de risque	Structures chimiques
Composé 2	Non CMR, pas de toxicité aiguë	25 (n=1)	101 (n=1)	Cluster 3	0	0,12	0	
		83 (n=1,5)	159 (n=1,5)					
Composé 3	Non enregistré	23,2	113,2	Cluster 3	0	0,04	0	
Composé 4	Non enregistré	22,6	78,6	Cluster 3	0	0,09	0	
Composé 5	Non enregistré	22,7	82,6	Cluster 3	0,10	0,50	0	

9/9

Fig.9

Composé	Données officielles ECHA	IC ₅₀ hAChE (mg/L)	IC ₅₀ eqBuChE (mg/L)	Cluster harmoniques sphériques	QSAR neuro-toxicité (%)	QSAR repro-toxicité (%)	Niveau de risque	Structures chimiques
Composé 6	Non enregistré	16,4	58,5	Cluster 3	0	0,52	0	
Composé 7	Non enregistré	18,3	120,2	Cluster 3	0	0	0	
Composé 8	Non CMR, pas de toxicité aiguë	26,3	94,7	Cluster 3	0,08	0,71	0	
Composé 9	Non enregistré	30	107	Cluster 3	0,12	0,9	0	
Composé 10	Non enregistré	27	97	Cluster 3	0,49	2,04	0	

ND signifie non déterminé.

NA: non applicable (cas des mélanges)

*PBT : Persistant, Bioaccumulatif et toxique