

TARTU ÜLIKOOL
Loodus- ja täppisteaduste valdkond
Keemia instituut
Molekulaartehnoloogia õppetool

Mihkel Kotli

Pestitsiidide toksilisuse ennustamine
organismile *Eisenia fetida*

Magistritöö (30 EAP)

Juhendaja: Geven Piir, PhD

Tartu 2022

Infoleht

Pestitsiidide toksilisuse ennustamine organismile *Eisenia fetida*

Resümee:

QSAR modelleerimine on arvutuslik alternatiiv pikkade ja sageli kulukate eksperimentide vältimiseks keemias ja sellega seotud suundades. Käesolevas töös luuakse klassifitseerimismudel pestitsiidide akuutse toksilisuse ennustamiseks organismile *Eisenia fetida* kasutades juhumetsa klassifitseerimisprobleemi lahendamiseks. Mudel ületab olemasolevat nii ennustus- kui üldistusvõimelt.

Võtmesõnad: QSAR, vihmauslaste akuutne toksilisus, pestitsiidid, juhumets

CERCS: P410 Teoreetiline ja kvantkeemia

Pesticide toxicity prediction on *Eisenia fetida*

Abstract:

QSAR modelling is a computational alternative to often costly or lengthy experiments in the field of chemistry and other related fields. In this work a classification model is established for the prediction of acute toxicity of pesticides on the organism *Eisenia fetida* using a random forest for the classification task. The model outperforms the existing one in both prediction power and applicability domain.

Keywords: QSAR, earthworm acute toxicity, pesticides, random forest

CERCS: P410 Theoretical chemistry, quantum chemistry

Sisukord

1	Sissejuhatus	4
2	Kirjanduse ülevaade	5
2.1	Pestitsiidid	5
2.2	<i>Eisenia fetida</i>	7
2.2.1	Ülevaade	7
2.2.2	Toksilisus organismile <i>Eisenia fetida</i>	7
2.3	QSAR	8
2.3.1	Deskriptorid	9
2.3.2	Mudeli hindamine	10
2.3.3	Olemasolevad <i>Eisenia fetida</i> QSAR mudelid	11
2.4	Juhumets	12
2.5	Shapley analüüs	13
2.6	Keemiline sarnasus	14
3	Metoodika	15
3.1	Andmekomplektide ettevalmistamine	15
3.1.1	Andmete kureerimine	15
3.1.2	3D struktuurid	15
3.1.3	Deskriptorite arvutamine	15
3.1.4	Treening- ja testkomplektide koostamine	16
3.2	Deskriptorite valimine	16
3.3	Klassifitseerimismudel	18
4	Tulemused ja arutelu	18
4.1	Valideerimine	19
4.2	Tõlgendamine	20
4.3	Väljajäänud andmekomplekt	25
5	Kokkuvõte	26
6	Summary	27
	viited	27
	Lisad	34
	Litsents	51

1 Sissejuhatus

Kahjuritõrjevahendeid ehk pestitsiide on inimene loodusesse paisanud aastatuhandeid, ent 20. sajandil kasvas nende kasutus nii mahus kui kasutatavates ühendides drastiliselt. Pestitsiidid arendatakse välja olles võimalikult spetsiifilised oma sihtmärkorganismile, ent kõiki võimalikke interaktsioone looduses esinevate eluvormide esindajatega on võimatu eksperimentaalselt testida. Alternatiivi loomkatsetele ja leevendust probleemile pakuvad arvutuslikud mudelid ehk kvantitatiivsed struktuur-aktiivsus sõltuvused.

Käesoleva töö eesmärgiks oli luua pestitsiidide lühiajalise toksilisuse ennustamise mudel põllumajanduslikult olulisse vihmauslaste sugukonda kuuluvale organismile *Eisenia fetida*.

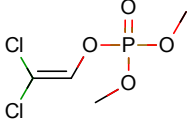
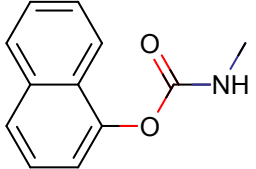
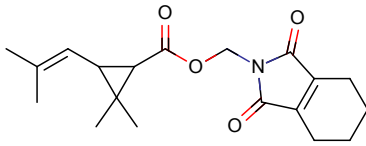
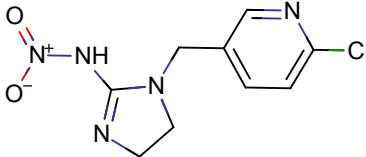
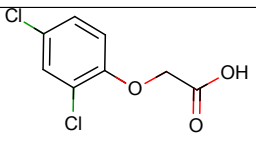
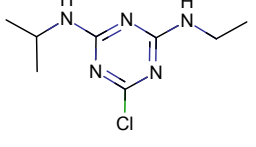
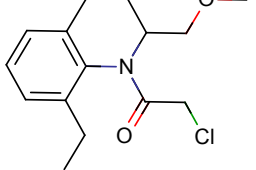
Järgmises peatükis tutvustatakse erinevaid pestitsiidiklasse ja nende kasutamise regulatsioone, vihmauslaste esindajat *Eisenia fetida* ja selle toksilisuse testimismeetodeid, antakse ülevaade kvantitatiivse struktuur-omadus sõltuvuste algtõdedest ning olemasolevatest *Eisenia fetida* toksilisuse mudelitest. Seejärel käsitletakse mudeli koostamiseks kasutatud masinõppemeetodeid. Metoodika peatükis antakse detailne ülevaade töö eesmärgiks olnud klassifitseerimisprobleemi lahendamisest. Eelviimases peatükis on toodud mudeli kvaliteedinäitajad, valideerimismeetrikad ja tõlgendused. Viimases peatükis tehakse kokkuvõtte tehtud tööst.

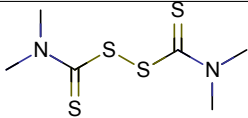
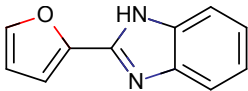
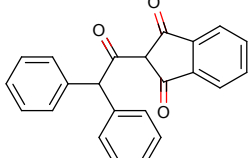
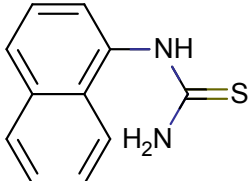
2 Kirjanduse ülevaade

2.1 Pestitsiidid

Pestitsiidid on ühendite klass, mille esindajaid lisatakse loodusesse eesmärgiga olla spetsiifiliselt surmav või kahjulik kindlatele eluvormidele. Aastas paisatakse loodusesse hinnanguliselt 3.5 miljonit tonni erinevaid pestitsiide [1]. Pestitsiide liigitatakse sõltuvalt nende sihtmärk-organismist, kusjuures iga alamklass võib koosneda keemiliselt väga erinevatest ühenditest, näiteid on toodud Tabelis 1 [2].

Tabel 1. Peamised pestitsiidide alamklassid

Alamklass	Sihtmärk	Ühendite klassid	Klassi esindaja
Insektitsiidid	Putukad	Organofosfaadid	
		Karbamaadid	
		Püreteroidid	
		Neonikotinoidid	
Herbitsiidid	Umbrohud	Klorofenoksü- ühendid	
		Triasiinid	
		Kloroatseetaniliidid	

Fungitsiidid	Seened	Ditiokarbamaadid	
		Bensimidasoolid	
Rodentitsiidid	Närilised	Antikoagulandid	
		Tiouuread	
...	...	...	...

Pestitsiidide kasutuselevõttu reguleerivad riikide keskkonna-, põllumajandus- ja toiduametid. Ameerika Ühendriikides *U.S. Environmental Protection Agency* [3], Euroopa Liidus annab heakskiidu Euroopa Komisjon ning lõpliku turule lubamise eest vastutavad iga riigi enda ametid (näiteks Eestis Põllumajandus- ja Toiduamet) [4]. Arenenud riikides (Kanada, Jaapan, jt.) on reeglina pestitsiide käsitlev seadusandlus võrdlemisi sarnane. Riikides, kus reguleerivad süsteemid pole vastaval tasemel välja kujunenud, annab soovitusi Maailma Terviseorganisatsioon WHO [2].

Pestitsiidide kasutamisel on vaieldamatud positiivsed mõjud: produktiivsuse kasv, kõrgemad põllumajanduslikud saagised ja nendest tulenev majanduslik kasu, haigustekitajate arvukuse piiramine, tarbitava toidu kvaliteedi kergitamine, hoonete-seadmete eluea pikenemine [5]. Kahjuks on pestitsiididega saastunud nii pinna- ja põhjavesi. Inimestes on täheldatud immunosupressiooni, hormonaalseid ja reproduktiivseid häireid ning soodumust vähkkasvajatele [6–8]. Lisaks üldise liigirikkuse vähendamisele ohustavad pestitsiidid mõndade toiduainete ja materjalide kättesaadavust: neonikotinoidid on vähendamas tolmlejade populatsioone ning paljusid allavoolu efekte ökosüsteemide toimimisele on raske ennustada enne nende juhtumist [9, 10]. Olgugi, et pestitsiidide ohtlikkust keskkonnale uuritakse enne turule toomist sadade uuringutega, ei ole paljud turul olevad pestitsiidid ohutud paljudele mitte-sihtmärk-organismidele [2, 11, 12].

2.2 *Eisenia fetida*

2.2.1 Ülevaade

Eisenia fetida ehk sõnnikuuss on vihmauslaste sugukonda kuuluv organism [13, 14].



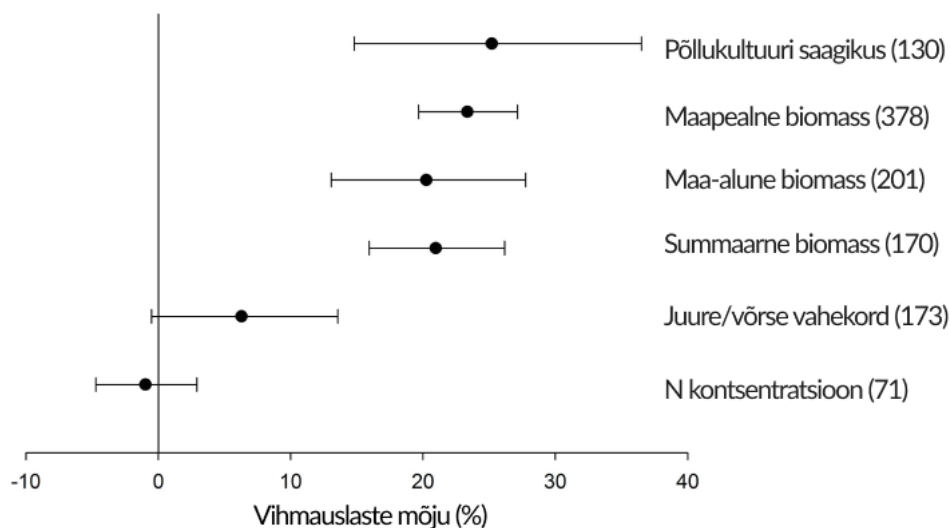
Joonis 1. Pilt organismist *Eisenia fetida* [15]

Vihmauslased on pinnase viljakuse aspektist ühed enimtähtsad pinnases elutsevad loomad. Lisaks muude mulla omaduste parandamisele on neil tänu sümbiootilistele suhetele mulla mikroflooraga võime muundada madalakvaliteedilisi orgaanilisi jäätmeid optimaalse C:N suhte ja mikroelementide sisaldusega taimekasvu soodustavaks viljakaks massiks [16].

Liigne ja/või mittespetsiifiliste pestitsiidide kasutamine põllumajanduslikel eesmärkidel on ohuks nii inimeste tervisele või eludele kui ka bioloogilisele mitmekesisusele ja ökoloogilistele süsteemidele, sealhulgas vihmauslastele [5, 17, 18]. Vihmauslaste arvukuse mõju pinnase kvaliteedile, pestitsiidide mõju vihmauslaste suremusele, sigimisvõimele ja kasvule on uurinud mitmed autorid [19–23]. Joonisel 2 on toodud meta-analüüsi tulemused vihmauslaste mõjust pinnase ja taimekasvu karakteristikatele. Meta-analüüsist selgus, et vihmauslased avaldavad taime kasvuga seotud karakteristikatele positiivset mõju. Kuigi *Eisenia fetida* kasutamisel vihmauslaste mudelorganismina on välja toodud puudujääke, on see liik ainus sugukonna esindaja, mille testimismeetodid on piisavas ulatuses standardiseeritud [21, 24–26].

2.2.2 Toksilisus organismile *Eisenia fetida*

Ökotoxikoloogia valdkonnas eristatakse toksilisuse vorme sõltuvalt nende avaldumisest. Primitiivseim eristus on akuutse ja kroonilise vahel, kus akuutne viitab ajaliselt lühikesele, ent tihti koguseliselt suurele doosile, krooniline vastupidiselt mahult väiksem ja mõjult pikem [27]. Lisaks eristatakse mõju elutegevusele (letaalsus), embrüonaalsele arengule (teratogeensus), paljunemisele, füsioloogiale, käitumisele, immunoloogiale. Majanduskoostöö ja arengu organisatsioon OECD koostatud akuutse letaalsuse testimismeetodist [25] organismile *Eisenia fetida* (OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Test no. 207) saab täheldada järgmiseid tingimusi:



Joonis 2. Meta-analüüsi tulemused vihmauslaste olemasolu mõjust pinnasekarakteristikatele. Sulgudes on toodud kaasatud uuringute arv. Joonis pärineb ja on tõlgitud artiklist [19]

1. Test viiakse läbi tehislikus pinnases 20 °C juures täiskasvanud organismidel;
2. Kokkupuude uuritava ühendiga on 7 päeva, organisme jälgitakse kokku 14 päeva;
3. Letaalsus väljendatakse ühikutes mg uuritavat ühendit kg⁻¹ pinnases, mis tapab poole populatsioonist (LC₅₀);
4. Iga ühendi mõju määratakse geomeetrilises kontsentratsioonijadas, maksimaalse astme alusega 2 ning jada pikkusega 5;
5. Tehakse vähemalt neli korduskatset (igas 10 ussi) koos nelja negatiivse kontrolliga;
6. Soovituslik on eeltest laiemas kontsentratsioonivahemikus.

Peale eelmainitu on OECD nr. 207 testis kirjeldatud ka kiirtest filterpaberil ning testis nr. 222 on toodud meetod kroonilise toksilisuse määramiseks mõjuna paljunemisele [26].

2.3 QSAR

Quantitative structure-activity relationship (QSAR) ehk Kvantitatiivne Struktuur-Aktiivsus Sõltuvus modelleerimine on arvutuslik lähenemine keemiliste andmete analüüsiks, luues empiirilisi, lineaarseid või mittelineaarseid seoseid aine ja omaduse vahel. Aine struktuurist tuleneva suuruse (deskriptori) ja tavaliselt eksperimentaalselt mõõdetava (bioloogiline aktiivsus, toksilisus, füüsikaline omadus, muud) omaduse vahelise seose väljaselgitamisel saab seda seost rakendada uute ainete ennustamiseks või loomiseks [28].

Aine omaduse ennustamine on käinud käsikäes koos keemia arenguga – näiteks 1884 formuleeris Mills seose n-alkaani süsinike arvu x ja alkaani sulamis- ning keemistemperatuuride vahel:

$$T_{\text{melt,boil}}(x) = \frac{\beta(x - c)}{1 + \gamma(x - c)},$$

kus γ , β , c on konstandid. Seda loetakse üheks esimeseks QSPR¹ mudeliks. Bioloogilist aktiivsust ennustasid esimest korda sulfanilamiididele 1942 Bell ja Roblin [29]. Tänapäevaks kasutatakse QSAR modelleerimist lisaks eelmainitutele ka farmatseutiliste [30], ADME², kosmeetiliste omaduste [31] ja sünteesiradade ennustamiseks [32]. Modelleerimisel hõlmatakse standardmeetodeid masinõppest nagu k-lähimad naabrid (*k-nearest neighbors*), osaliste vähimruutude regressioon (*partial least squares*), tugivektor-masin (*support vector machine*), juhumets (*random forest*), närvivõrgud ja teised [28]. Arvutusliku mudeli kasutamine uue aine omaduse ennustamiseks on tihtipeale kiirem ja odavam kui eksperimentaalne määramine.

Kõik QSAR mudelid põhinevad ideel, et sarnased ühendid on sarnaste omadustega ning uuritav omadus Φ on väljendatav funktsioonina f keemilisest struktuurist S [33]:

$$\Phi = f(S)$$

Φ väärtus on kvalitatiivne (nt. toksiline/mittetoksiline) klassifitseerimismudelite korral ning kvantitatiivne (nt. LD_{50}) regressioonimudelite korral. Eristatakse ka järjestavaid mudeleid, mis seavad sisendstruktuurid järjekorda vastavalt uuritava omaduse kasvule või kahanemisele [34, lk. 34].

2.3.1 Deskriptorid

Esimesed deskriptorid tulenesid eksperimentaalsetest väärtustest, ent Kier et al. tutvustasid deskriptoreid kui matemaatilisi konstruktsioone: deskriptor on matemaatiliste ja loogiliste teisenduste lõpptulem, mis muundab osa ühendis peituvast keemilisest informatsioonist üheselt defineeritud arvsuuruseks [34]. Sõltuvalt sisendiks nõutava info keerukusest, jagunevad deskriptorid oma dimensionaalsuse järgi: sidemeid või aatomeid loendavad 0D deskriptorid; molekulaarseid fragmente loendavad 1D sõrmejäljed; molekulaarsest graafist tulenevad topoloogilised 2D deskriptorid; konformatsioonist sõltuvad 3D deskriptorid, mis kodeerivad geomeetrilisi, elektroonilisi,

¹QSPR ehk *Quantitative structure-property relationship*. Akronüüme QSPR, QSAR, QSTR, QSBR jne kasutatakse modelleeritava lõppomaduse täpsustamiseks, kuigi peamine idee on neil sama.

²ADME ehk Absorptsioon, Distributsioon, Metabolism ja Ekskretsioon.

kvantmehaanilisi suurusi. Tuntakse ka orientatsioonist sõltuvaid 4D deskriptoreid, orientatsioonist ja konkreetselt molekuli ümbritsevast pseudo-retseptorist sõltuvaid 5D deskriptoreid ning veelgi kõrgema dimensionaalsusega deskriptoreid [35].

2.3.2 Mudeli hindamine

QSAR mudeli puhul loetakse tähtsaimaks selle võimet ennustada uuritavat omadust uutele ühenditele, hea sobitumine mudeli arendamiseks kasutatud andmepunktidele ei ole piisav. Mudeli valideerimiseks ja ennustusvõime hindamiseks on levinud kaks peamist strateegiat: sisemine valideerimine ja väline valideerimine.

Sisemine valideerimine viiakse läbi kasutades ennustusvõime hindamiseks ühendeid, mida kasutati ka mudeli arendamiseks. Enimkasutatud meetod on ristvalideerimine ja selle variandid, mis üldkujul viiakse läbi järgnevalt: N ühendist koosnev andmekomplekt jagatakse t_1 ühendiga treeningkomplektiks ja $v_1 = N - t_1$ ühendiga valideerimiskomplektiks, mudel treenitakse kasutades t_1 ühendeid ning ennustusvõimet hinnatakse v_1 ühenditel. Protsessi korratakse k korda erinevate alamkomplektidega $(t_2, v_2), \dots, (t_k, v_k)$. Suuremad k väärtused nõuavad suuremat arvutuslikku ressursi, sest mudelit tuleb treenida k korda. Kui $k = N$, siis treenitakse N mudelit ning igas iteratsioonis on valideerimiskomplekti suuruseks 1 ühend ehk jäta-üks-vahel ristvalideerimine (*leave-one-out crossvalidation*) [35, lk. 236]

Väline valideerimine viiakse läbi jagades andmekomplekti treening- ja testkomplektiks, ent kasutamata testkomplektis peituvat infot mudeli kujundamisel. Hea testkomplekt katab deskriptorite ruumis võrreldes treeningkomplektiga võimalikult suure ja sarnase ruumi. Sellise jaotuvust taotlevad mitmed lähenemised: juhuslik valik; Y-põhine ehk omadusepõhine valik, kus ühendite jaotamisel võetakse arvesse uuritava omaduse väärtust; X-põhine ehk deskriptoritepõhine valik, kus jaotamisel võetakse arvesse ühendite sarnasust. X-põhise valiku läbi viimiseks on kasutusel mitmeid algoritme [35, lk. 236].

Meetrikad klassifitseerimismudelite headuse määramiseks ja erinevate mudelite võrdlemiseks on toodud valemites (1) – (5) [35, lk. 255]. TP on tõeste positiivsete arv, TN tõeste negatiivsete arv, FP valepositiivsete arv, FN valenegatiivsete arv.

Täpsus ehk *accuracy* on õigesti ennustatud ühendite ja kõigi ühendite suhe.

$$\text{Täpsus} = \frac{TP + TN}{TP + TN + FN + FP} \quad (1)$$

Tundlikkus ehk *sensitivity* on õigesti ennustatud positiivsete ja tegelike positiivsete suhe.

$$\text{Tundlikkus} = \frac{TP}{TP + FN} \quad (2)$$

Spetsiifilisus ehk *specifity* on õigesti ennustatud negatiivsete ja kõigi negatiivsete suhe.

$$\text{Spetsiifilisus} = \frac{TN}{TN + FP} \quad (3)$$

Positiivse klassi ennustusmäär ehk *positive predictive value* PPV on tõenäosus, et positiivsesse klassi ennustatud ühend on tegelikult positiivne.

$$\text{PPV} = \frac{TP}{TP + FP} \quad (4)$$

Negatiivse klassi ennustusmäär ehk *negative predictive value* NPV on tõenäosus, et negatiivsesse klassi ennustatud ühend on tegelikult negatiivne.

$$\text{NPV} = \frac{TN}{TN + FN} \quad (5)$$

n klassiga klassifitseerimismudelite korral on ka tavaks esitada tegelikud ja ennustatud väärtused ($n \times n$) eksimismatriksi kujul (näide toodud Tabelis 2), kust on vajadusel võimalik soovitud meetrikaid leida või arvutada.

Tabel 2. (2×2) eksimismatriks koos seletustega

		Ennustatud		
		NEG	POS	
Tegelik	NEG	TN	FP	Spetsiifilisus (3)
	POS	FN	TP	Tundlikkus (2)
		NPV(5)	PPV(4)	Täpsus (1)

2.3.3 Olemasolevad *Eisenia fetida* QSAR mudelid

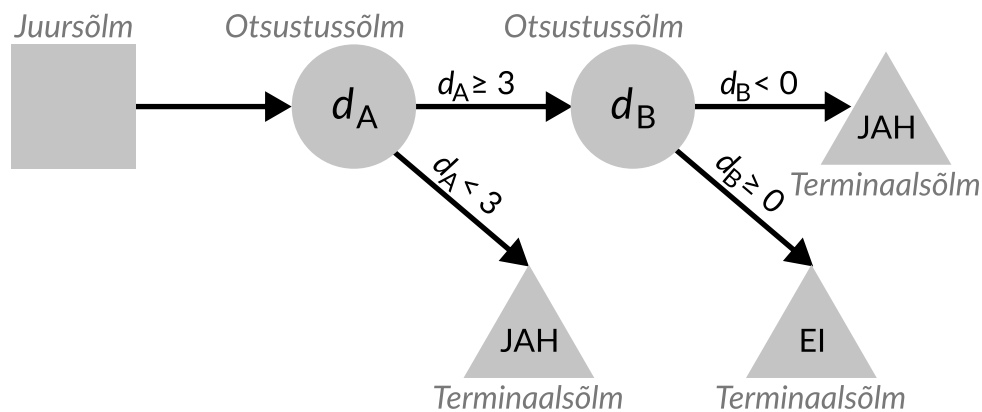
Web of Science ja ScienceDirect andmebaasidest on leitavad kaks avaldatud *Eisenia fetida* toksilisuse mudelit. Ghosh *et al.* [36] 2019. aasta 8 deskriptoriga lineaarne regressioonimudel

ennustab akuutset toksilisust, mudeli koostamiseks kasutati 43 ühendit, mudel valideeriti 14 ühendil, peamiseks meetrikuteks $R^2 = 0.765$, $Q^2 = 0.614$. Roy *et al.* [37] 8 deskriptoriga 117 ühendiga lineaarne klassifitseerimismudel ennustab samuti akuutset toksilisust, mudel valideeriti 46 ühendil. Testkomplektil tundlikkus, spetsiifilisus, täpsus vastavalt 0.5882, 0.7931, 0.7174.

2.4 Juhumets

Juhumets on masinõppemeetod, mis kasutab mitmete otsustuspuude konsensusotsust klassifitseerimisprobleemi lahendamiseks, ent juhumetsa on laiendatud ka regressiooniprobleemide lahendamiseks.

Otsustuspuu on loogilist arutlust meenutav puusarnane diagramm. Puu koosneb kolme tüüpi sõlmedest, initsieerivast juursõlmest, propageerivatest otsustussõlmedest ning termineerivatest terminaalsõlmedest. Joonisel 3 on näitena toodud primitiivne binaarset (JAH/EI) omadust ennustav, kahte deskriptorit (d_A ja d_B) kasutav otsustuspuu [35, lk. 226]. Otsustuspuudel on palju



Joonis 3. Primitiivne otsustuspuu

häid omadusi: nad on lihtsasti tõlgendatavad, ei nõua sisendandmete normaliseerimist, ei eelda sisendandmete lineaarsust ning tulevad hästi toime kõrgdimensionaalsete andmepunktidega. Kahjuks on otsustuspuud ebastabiilsed (väike muutus sisendis võib tingida suure muutuse puu struktuuris) ning otsustuspuud kipuvad ülesobituma treeningandmetele [38, lk. 86]. Puuduste leevendamiseks kasutatakse paljudest otsustuspuudest koosnevat ansambelmeetodit juhumets.

Juhumets kasutab mitmeid otsustuspuuid, iga puu kasvatamiseks kasutatakse juhuslikult vähendatud treeningkomplekti, kus vähendatud on nii andmepunktide arvu kui ka deskriptorite arvu. Rusikareegliks loetakse u. 70% andmepunktide ja $\sqrt{D}$ deskriptori kasutamist, kus D on

kõigi juhumetsa deskriptorite arv. Puu kasvatamisel jagatakse igas otsustussõlmes allesolevad andmepunktid kaheks osaks selliselt, et mõlemas osas olevad andmepunktid oleks klassiliselt võimalikult homogeensed. Pärast treeningandmete sobitumist on kõigi otsustuspuude terminaali otsustussõlmed fikseeritud. Ennustuse tegemisel leitakse iga juhumetsa kuuluva otsustuspuu ennustuse tulemus ning lõplik otsus on enamuse otsus. Ennustust andmepunktidele, mis puu koostamisel treeningkomplektist välja jäid, kutsutakse *out of bag* ennustuseks ning sisuliselt on tegu ristvalideerimisega. Peamised ennustusvõimet mõjutavad parameetrid on otsustuspuude arv metsas ja deskriptorite arv puus. Juhumetsa puuduseks on nende raskem tõlgendamine. Sarnaselt otsustuspuudegagi saavutavad juhumetsad treeningkomplektil pea ideaalseid tulemusi, ent nende üldistusvõime uutel andmetel on tunduvalt etem kui otsustuspuudel. [34, lk. 50]

2.5 Shapley analüüs

Keemiainformaatikas on valdavalt eelistatud lihtsastitõlgendavaid meetodeid nagu multilineaarne regressioon ja diskriminantanalüüs. Sageli, ent mitte alati, annavad kompleksamad masinõppe meetodid nagu tugivektor-masina, närvivõrgud ja juhumetsad paremaid ennustustulemusi, aga on sealjuures ka raskemini tõlgendatavad [39, 40]. Tõlgendamisprobleemi lahendamiseks on välja pakutud esialgse ennustava mudeli f analüüsimist teisese nn. seletusmudeliga g . Additiivsed seletusmudelid jaotavad ennustuse panuselisteks osadeks, kus iga deskriptori panus on võrdne selle tähtsusega ennustuse kujunemisel. Näiteks D deskriptoriga mudeli puhul on i -nda deskriptori panus ϕ_i :

$$f(x) \approx g(x) = \phi_0 + \sum_i^D \phi_i x_i. \quad (6)$$

Shapley väärtus on nobelisti L. S. Shapley poolt 1951. aastal välja pakutud idee edasiarendus ϕ_i leidmiseks [41]:

$$\phi_i = \sum_{S \subseteq D \setminus \{i\}} \frac{|S|!(|D| - |S| - 1)!}{|D|!} [f_{S \cup \{i\}}(x_{S \cup \{i\}}) - f_S(x_S)] \quad (7)$$

Valemis (7) leitakse kombinatsioone üle kõigi võimalike deskriptorite D alamhulkade. Lundberg et al. leidsid viisi, kuidas seda arvutust lihtsustada ning andsid oma lähenemisele nime *SHAP Values* [40].

2.6 Keemiline sarnasus

Keemilise sarnasuse printsiip on ravimiarenduses ja keemiainformaatikas kesksel kohal. Sarnasuse väljendamiseks on välja pakutud erinevaid viise: füüsikalis-keemilised omadused, topoloogilised indeksid, molekulaargraafid, farmakofoorsed omadused, molekulaarkujud, molekulaarväljad. Väljendatud sarnasuse kvantifitseerimiseks on samuti hulgaliselt võimalusi: Tanimoto koefitsient, Dice'i indeks, koosiinuskoefitsient, eukleidiline kaugus, Tversky indeks [42].

3 Metoodika

3.1 Andmekomplektide ettevalmistamine

3.1.1 Andmete kureerimine

Andmed laeti alla PPDB andmebaasist [43]. Esialgne andmekomplekt sisaldas 2418 ühendit. Al- lalaetud andmekomplektist eemaldati ühendid, millel puudusid *Eisenia fetida* akuutse toksilisuse (14 päeva LC₅₀) andmed, metallorgaanilised ühendid, duplikaadid, segud, anorgaanilised soolad, orgaanilised soolad protoneeriti. Andmekomplektist avastati hulgaliselt ebakõlasid: ühendite mit- tekorrektsed nomenklatuursed nimetused, mittekattuvused InChi ja SMILES identifitseerijatest tuletatud struktuuride vahel. Ebakorrektsete ühendite filtreerimiseks toimiti järgnevalt:

1. Kasutades kahe erineva andmebaasi (CADD grupi [44] ja PubChemi [45]) rakendusliidest päriti mõlemast andmebaasist parimat SMILES'i vastet antud nimetusele.
2. Kui CADD ja PubChemi andmebaasist pärinevad SMILES'id kattusid omavahel ja kat- tusid ka PPDB andmebaasi ühendiga, loeti ühend korrektseks. Vastasel juhul loeti ühend ebakorrektseks. Kaks struktuuri on kattuvad, kui nende sõrmejälgede Tanimoto koefitsent on võrdne arvuga 1.
3. Kõik ebakorrektsed ühendid või ühendid, millele ei suudetud leida vastet vaadati üle käsitsi. Kureeritud andmekomplekt sisaldas 951 ühendit.

3.1.2 3D struktuurid

Kureeritud andmekomplekti struktuurid standardiseeriti PubChemi rakendusliidesega (tautomeer- sete vormide ühildamine, valents nitrorühmades, aromaatsuse lisamine jne) ning seejärel arvutati 3D struktuurid SMILES'idest kasutades teegis RDKit [46] implementeeritud MMFF94s [47] jõuvälja.

3.1.3 Deskriptorite arvutamine

16384 deskriptorit arvutati vabavaralise OChem veebiserveri rakendusega [48]. Rakendus laseb kasutajal arvutada erinevatest levinud programmidest pärinevaid deskriptorikomplekte, antud töös hõlmati järgmistest programmidest pärinevad komplektid: ALogPS [49], alvaDesc [50], EPA (T.E.S.T.) [51], KrakenX [52], MOPAC2016 (MOPAC basic) [53], Estate [54], PyDescrip- tor [55]. Pärast puuduvate väärtustega ja 0 hajuvusega deskriptorite eemaldamist jäi alles 11614

deskriptorit. Seejärel arvutati deskriptorite omavaheline korrelatsioonimaatriks ning eemaldati iteratiivselt deskriptoreid, mille omavaheline korrelatsioonikoefitsient oli suurem kui 0.95, kus igas iteratsioonis eemaldati see deskriptor, mille korrelatsioonikoefitsientide absoluutväärtuste summa kõigi teiste deskriptoritega oli suurim. Pärast korreleeruvate deskriptorite eemaldamist jäi alles 3846 deskriptorit.

3.1.4 Treening- ja testkomplektide koostamine

Klassifitseerimismudeli andmekomplektide koostamiseks teisendati esmalt arvulised ja vahemikulised toksilisused binaarseteks. Vahemikuliste all peetakse siinkohal silmas mõõtmistulemusi nt. $>400 \text{ mg kg}^{-1}$ või $<237 \text{ mg kg}^{-1}$, arvuliste all tulemusi 400 mg kg^{-1} . Arvulised väärtused 1000 mg kg^{-1} ja väiksemad loeti toksilisteks ning suuremad vastavalt mittetoksilisteks. Andmekao minimeerimiseks loeti vahemikulised väärtused $>300 \text{ mg kg}^{-1}$ ja väiksemad toksilisteks, >1000 ja suuremad mittetoksilisteks ning $>(300...1000) \text{ mg kg}^{-1}$ jäeti kõrvale. Seejärel jagati klassideks teisendatud toksilisused treening- ja testkomplekti, suuruste suhetega 80:20 kasutades Kennard-Stone algoritmi [56]. Kaugusmeetrikuna kasutati Tanimoto sarnasusest arvutatud erinevust, kus kahe ühendi c ja j kaugus on arvutatud Morgani sõrmejälgedest raadiusel 4:

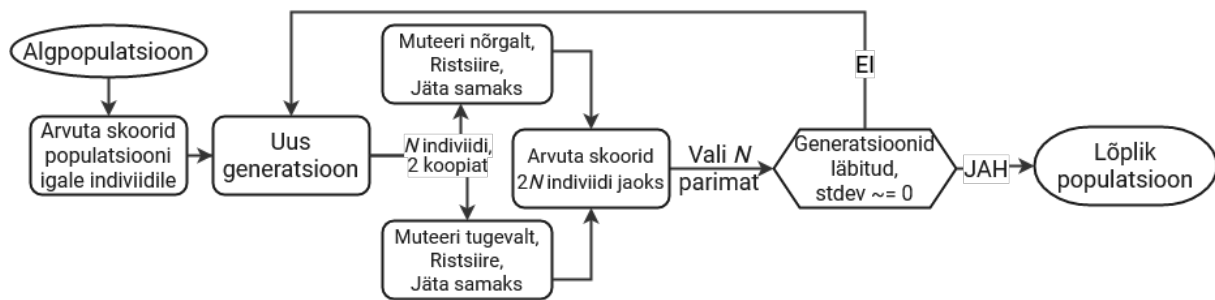
$$E_{c,j} = \frac{1}{1 + \text{Tanimoto}(\text{Morgan}_4(c), \text{Morgan}_4(j))}.$$

Treeningkomplekti jäi 552 ühendit ning testkomplekti 138.

3.2 Deskriptorite valimine

Masinõppes, sealhulgas QSAR mudelite koostamisel, on liiga paljude, liiga väheste või mitte-asjakohaste deskriptorite valik laastava mõjuga mudeli ennustus- ja üldistusvõimele [57, 58]. Käesolevas töös kasutatavate deskriptorite arvu vähendamiseks implementeeriti autorite Cetini ja Gundomuse [59] artiklist inspireerituna teegi deap [60] abil Joonisel 4 toodud geneetiline algoritm, kus skoorina kasutati *out-of-bag* ennustustäpsust. Geneetilist optimeerimist teostati Molekulaartechnoloogia õppetooli arvutiserveris Asklepios.

Algpopsulatsioon Arvukate võimalike deskriptorivalimite esitamiseks kodeeriti need bitivektorina – kõikide deskriptorite järjestatud hulgale suurusega m vastab bitivektor ehk genoom pikkusega m . Näiteks Joonisel 5 kodeerib $d_0 : \{D, I\}$ ning $d_1 : \{A, C, F, I\}$



Joonis 4. Geneetilise algoritmi skeem

	m deskriptorit									
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
d_0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0
d_1	1	0	1	0	0	1	0	0	1	0

Joonis 5. Deskriptori kodeerimine geeniks.

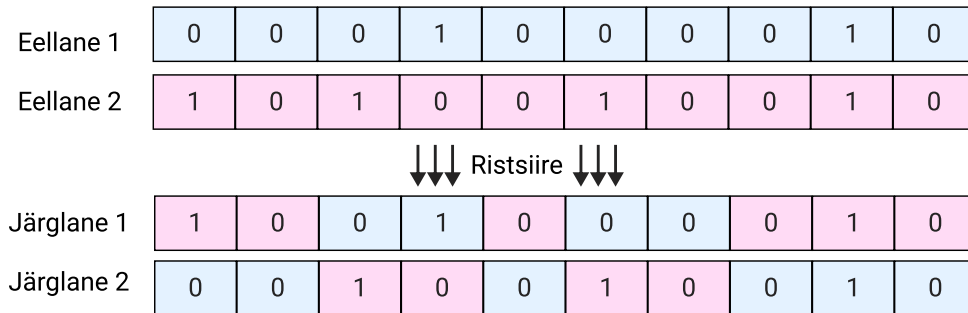
Algpopulatsioon loodi pseudojuhuslikult. Eelkatsete käigus avastati ~100 deskriptori suhtelist paremat ennustusvõimet. Seda infot kasutati algpulatsiooni loomisel järgnevalt:

1. Valiti eelneva info põhjal "hästikäituv" deskriptor.
2. Kodeeriti nullidest (inaktiivsetest geenidest) koosnev bitivektor ainult selle ühe omadusega (000...0100...000).
3. Viidi läbi 3-10 juhuslikult valitud biti inversiooni (aktiveeriti geenid).
4. 1.-3. korral kõigi "hästikäituvate" deskriptorite jaoks.
5. Kõik järgnevad isendid moodustati nullide vektorist juhuslikult 3-10 inversiooniga.

Mutatsioon Mutatsioonioperaatorina rakendati igale muteeritavale d kogumile bitiinversiooni. Inversiooni juhtumise sõltumatu tõenäosus igale geenile oli $\frac{4}{\text{kõigi deskriptorite arv} \cdot m} = \frac{4}{3846} \approx 0.001$. Teisisõnu tehakse bitivektoris pikkusega 3846 igale bitile inversioon tõenäosusega ≈ 0.001 . Väärtus 0 tähendab, et vastavat deskriptorit ei kaasata ning väärtus 1 tähendab et see deskriptor kaasatakse juhumetsa treenimisel.

Ristsiire Ristsiire on genoomide segunemine paljunemisel. Kahest eellasest tekitatakse järglasi selliselt, et järglase genoomis oleks geene mõlemalt vanemalt. Antud töös kasutati operaatorit, mis tekitab kaks järglast selliselt, et järglane 1 on eellase 1 kloon, kus iga geen on tõenäosusega

0.5 vahetatud eellaselt 2 pärineva geeniga. Analoogselt on järglane 2 eellase 2 kloon, kus vahetus on tehtud eellase 1 geenidega. Näide toodud joonisel 6.



Joonis 6. Ristsiire geneetilises algoritmis.

Jäta samaks Jäta samaks operaator tekitab eellasest järglase selliselt, et genoomis ei toimu ühtki muutust.

Valik Valikuoperaatorina kasutati ruletiratta valikut. Iga indiviidi valimise tõenäosus on proportsionaalne tema skooriga: indiviidi i , skooriga f_i valimise tõenäosus $2N$ indiviidi hulgast on

$$p_i = \frac{f_i}{\sum_{j=1}^{2N} f_j}.$$

3.3 Klassifitseerimismudel

Lõplik klassifitseerimismudel koostati juhumetsa meetodiga kasutades teeki `scikit-learn` [61]. Mudeli treenimisel kasutati 552 ühendiga andmekomplekti, kus iga otsustuspuu ehitamisel hõlmati 60% ühendeid. Juhumets kasutab 14 deskriptorit, kus iga puu ehitatakse 4-st deskriptorist ning juhumetsa puude arv on 121. Lõplik deskriptorite hulk kujunes geneetilise optimeerimise tulemusest saadud deskriptoritekomplekti manuaalse analüüsi tulemina. Valideerimiseks kasutati 138 ühendiga testkomplekti.

4 Tulemused ja arutelu

Töö tulemuseks saadi akuutse letaalsuse ennustamise mudel, mis jaotab ühendid kahte klassi (toksilised ja mittetoksilised), kus kahe klassi piiriks on 1000 mg kg^{-1} ühendit pinnases. Klassid

treeningkomplektis (54% mittetoksiline / 46% toksiline) ja testkomplektis (46% mittetoksiline / 54% toksiline) olid piisavas ulatuses tasakaalus, et ei peetud vajalikuks kaalude kasutamist ega muid tasakaalustamise meetmeid. Mudeli ennustustäpsus treeningkomplektil on toodud Tabelis 3.

Tabel 3. Klassifitseerimismudeli treeningkomplekti eksimismatriks

		Ennustatud toksilisus		
		Mittetoksiline	Toksiline	
Tegelik toksilisus	Mittetoksiline	283	15	0.9
	Toksiline	30	224	0.88
		0.90	0.94	0.92

Kõrge ennustustäpsus treeningkomplektil on tingitud meetodi eripärast. Sarnaselt individuaalsete otsustuspuudega on ennustused juhumetsas treeningkomplektil väga head. Realistlikuma hinnangu ennustusvõimest annavad valideerimiste tulemused.

4.1 Valideerimine

Mudeli ristvalideerimise ennustus treeningkomplekti *out of bag* tulemusena ja ennustus testkomplektil on toodud eksimismatriksitena vastavalt Tabelites 4, 5.

Tabel 4. Klassifitseerimismudeli treeningkomplekti *out of bag* eksimismatriks

		Ennustatud toksilisus		
		Mittetoksiline	Toksiline	
Tegelik toksilisus	Mittetoksiline	230	68	0.77
	Toksiline	72	182	0.72
		0.76	0.73	0.75

Heas kooskõlas ristvalideerimise ja testkomplekti täpsused 0.75 ja 0.80 on realistlikud hinnangud mudeli ennustusvõimele. Huvipakkuv on tundlikkuse väiksem suurus võrreldes spetsiifilisusega kõigil andmekomplektidel. See võib olla tingitud vahemikuliste väärtuste kasutamisega kaasnevast süstemaatilisest veast: näiteks eksperimentaalse toksilisusega $>100 \text{ mg kg}^{-1}$ ühendi

Tabel 5. Klassifitseerimismudeli testkomplekti eksimismaatriks

		Ennustatud toksilisus		
		Mittetoksiline	Toksiline	
Tegelik toksilisus	Mittetoksiline	53	10	0.84
	Toksiline	18	57	0.76
		0.75	0.85	0.8

klassiks määrati toksiline klass, ent tegelik eksperimentaalne väärtus võib olla 1100 mg kg^{-1} . Laialdase kasutamise aspektist oleks pigem eelistatud suurem tundlikkus kui spetsiifilisus – mittetoksilise ühendi klassifitseerimine toksiliseks on vastuvõetavam kui toksilise ühendi klassifitseerimine mittetoksiliseks.

Eelnevast hoolimata on võrreldes Roy et al. klassifitseerimismudeliga käesoleva töö klassifitseerimismudeli tundlikkus testkomplektil oluliselt kõrgem (0.59 vs 0.76). Samuti on kõrgemad ka käesoleva mudeli teised kvaliteedimeetrikud. Lisaks kasutati mudeli koostamisel enam kui 4 korda rohkem ühendeid, mille alusel võib väita, et rakenduspiirkond on samuti suurem.

4.2 Tõlgendamine

Joonisel 7 on toodud Shapley additiivne selgitusgraafik, kus on toodud deskriptori mõju lõpliku ennustuse kujunemisel. Väärtuste arvutamiseks kasutati teeki SHAP [62]. Deskriptorite definitsioonid on toodud tähtsuse järjekorras Tabelis 6, kus tähtsus on vastava deskriptori Shapley väärtuste absoluutväärtuste summa.

Tabel 6. Klassifitseerimismudeli deskriptorite definitsioonid

Deskriptor	Definitsioon	V.
X3A	Servade arvuga keskmistatud 3. järku Randici indeks	[50]
P_VSA_ppp_A	Vesiniksideme aktseptorite van der Waalsi pindala	[50]
don_O_2B	Vesiniksideme doonoraatomite arv kuni 2 sideme kaugusel hapnikuaatomitest	[55]
SpDiam_EA(bo)	Sideme kordsustega kaalutud molekulaargraafi naabrusmaatriksi maksimaalne omaväärtus	[50]
acc_N_5Bc	Vesiniksideme aktseptoraatomite osalaengute summa, mis asuvad kuni 5 sideme kaugusel lämmastikuaatomitest	[55]

MATS5m Moran autokorrelatsioon kaugusel 5 kaalutud molaarmassiga, täpsemalt [51]

$$\text{MATS5m} = \frac{\frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^A \sum_{j=1}^A \delta_{ij} (m_i - \bar{m})(m_j - \bar{m})}{\frac{1}{A} \cdot \sum_{i=1}^A (m_i - \bar{m})^2},$$

kus m on aatomi mass, A on aatomite arv, i ja j aatomeid, $\delta_{ij} \in 0, 1$ ja on võrdne ühega ainult kui i ja j on kaugusel 5 sidet, Δ on kõigi aatompaaride arv kaugusel 5

RDF030s Radiaaldistributsioonifunktsioon kaugusel 3Å kaalutud omaolekuga I , täpsemalt $g(R = 3\text{Å})$ väärtus funktsioonile [50]

$$g(R) = \sum_{i=1}^{A-1} \sum_{j=i+1}^A I_i \cdot I_j \cdot \exp(-\beta(R - r_{rj})^2),$$

$I_i = \frac{(2/L_i)^2 \cdot \delta_i^v + 1}{\delta_i}$, kus L , δ^v ja δ on vastavalt peakvantarv, valents-elektronide arv, σ -elektronide arv.

R6uplus Aatomite ruumilisest paiknemisest ja omavahelistest keemilisest sidestusest kaugusel 6 arvutatud GETAWAY deskriptor [51]

R6v+ Aatomite ruumilisest paiknemisest ja omavahelistest keemilisest sidestusest kaugusel 6 arvutatud GETAWAY deskriptor, kaalutud van der Waalsi raadiusega [50]

GATS1m Geary autokorrelatsioon kaugusel 1 kaalutud molaarmassiga, täpsemalt [50]

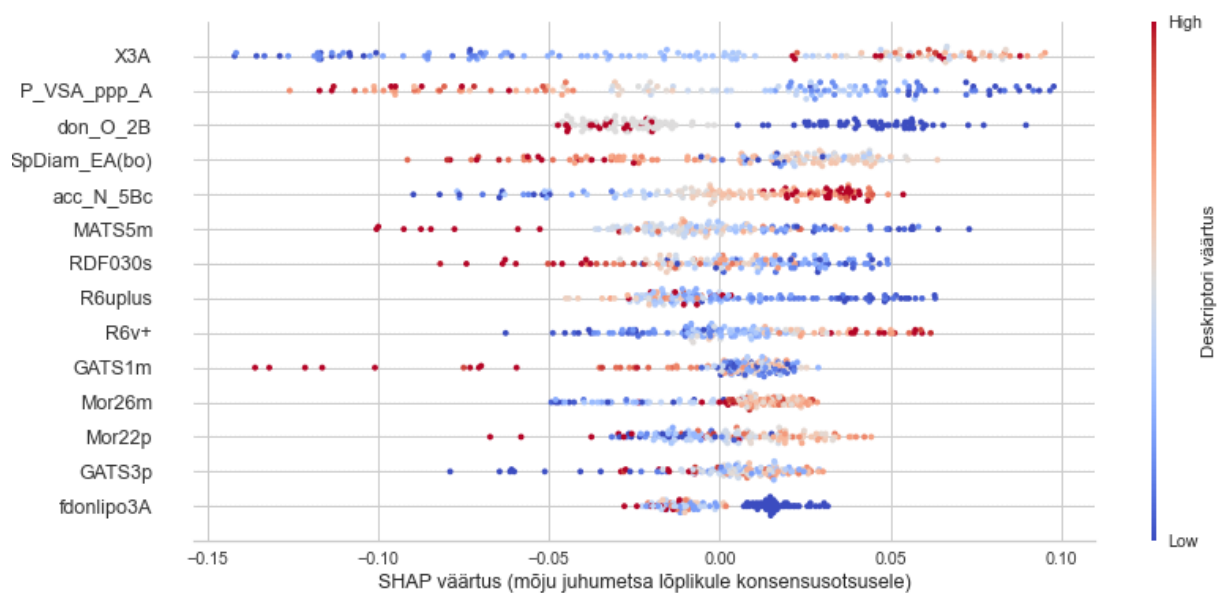
$$\text{GATS1m} = \frac{\frac{1}{2\Delta} \sum_{i=1}^A \sum_{j=1}^A (m_i - m_j)^2}{\frac{1}{A-1} \cdot \sum_{i=1}^A (m_i - \bar{m})^2},$$

kus m on aatomi mass, A on aatomite arv, i ja j tähistavad kovalentset sidet jagavaid aatomeid, Δ on kõigi i ja j paaride arv

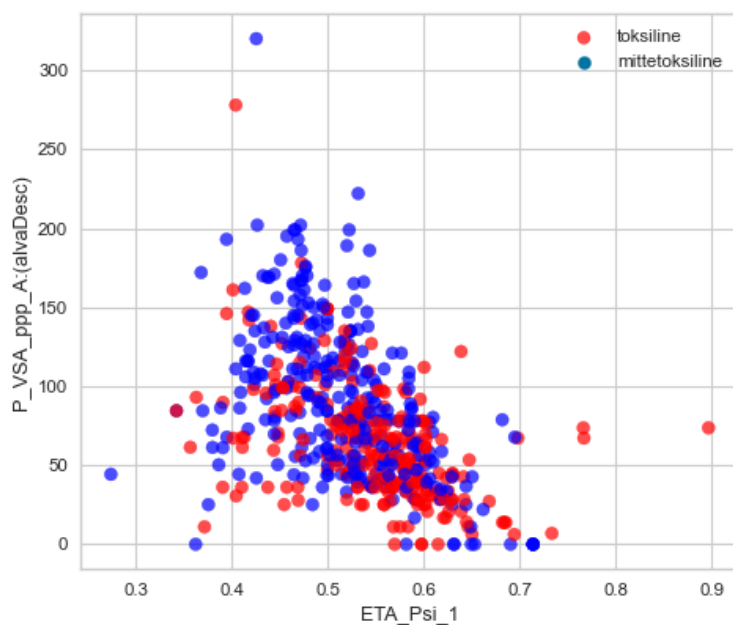
Mor26m	3D-MoRSE (<i>3D-molecule representation of structures based on electron diffraction</i>) deskriptorid kodeerivad aatomite paiknemist ja keemilist iseloomu kasutades difraktsioonanalüüsist pärinevat teisenduse analoogi, üldkujul [50]
	$\text{MorXXy} = \sum_{i=1}^{A-1} \sum_{j=i+1}^A y_i \cdot y_j \cdot \frac{\sin(\lambda \cdot r_{ij})}{\lambda \cdot r_{ij}},$ kus XX on lainemaksimumi järk ($XX = \lambda + 1$), r_{ij} aatomite vahekaugus, A aatomite arv, y kaaluna kasutatav omadus. Mor26m puhul on omaduseks aatomi mass ja $\lambda = 25$.
Mor22p	Sarnane deskriptorile Mor26m, aga $\lambda = 21$ ja kaaluna kasutatav omadus on aatomi polariseeritavus [50]
GATS3p	Geary autokorrelatsioon kaugusel 3 kaalutud aatomi polariseeritavusega. Leitakse sarnaselt deskriptoriga GATS1m, ent i ja j on üksteisest kaugusel 3 sidet, summeeritakse üle kõigi võimalike sel-liste aatompaaride ja Δ on võimalike paaride arv. [50]
fdonlipo3A	Lipofiilsete aatomite arv kaugusel 3 Å vesiniksideme doonorist [55]

Jooniselt 7 on näha, et positiivselt panustavad X3A, acc_N_5Bc, Mor26m ja Mor22p. X3A suurtele väärtustele vastavad lineaarsed vähehargenenud molekulid. See deskriptor oli tähtsuselt oluliseim ka Roy et al. klassifitseerimismudelil, kus pakuti välja, et deskriptori mõju toksilisusele on seotud üldise lipofiilsusega, mis tingib bioakumulatsiooni ussides.

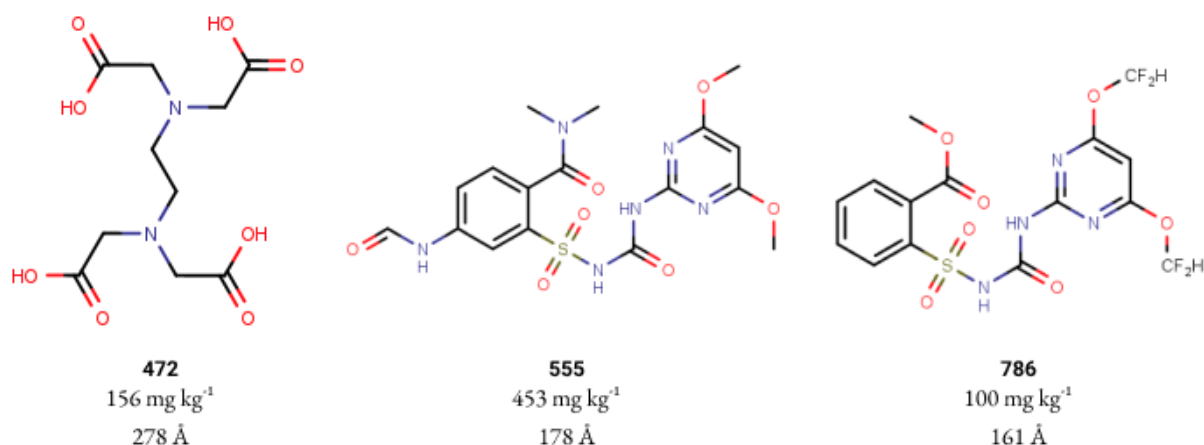
P_VSA_ppp_A mõju võib panustada ühendi absorptsiooni vähenemisele soolestikus – suur aktseptorite van der Waalsi pindala tähendab ka head lahustumist vees, mis ei lase ühendil läbi soolestiku imbuda. Selle deskriptori mõju toksilisusele võib tunduda otseses vastuolus Roy et al. toodud järeldusega, kus väidetakse et toksilistel ühenditel on suurem võime moodustada vesiniksidemeid kui mittetoksilistel. Vastuolu uurimiseks arvutati käesoleva töö treeningkomplekti ühenditele Roy et al. töös kasutatud deskriptor ETA_Psi_1 ning võrreldi seda P_VSA_ppp_A väärtustega Joonisel 8. Jooniselt on näha negatiivne korrelatsioon deskriptorite vahel, mis ei sea kaht väidet vastuollu. Teise huvitava asjaoluna saab välja tuua ühendite hulga, mille vesiniksidemete aktseptorite van der Waalsi pindala on suurem kui 150 Å. Selles hulgas on 3 toksilist ühendit ja 39 mittetoksilist ühendit. Need kolm ühendit koos struktuurivalemite ja P_VSA_ppp_A väärtustega on toodud Joonisel 9.



Joonis 7. Juhumetsa ennustuse Shapley väärtused testkomplektil. Positiivne SHAP väärtus tähendab, et ühend klassifitseeritakse tõenäolisemalt toksilisse klassi, negatiivne SHAP vastavalt mittetoksilisse klassi. Suurele deskriptori väärtusele vastab punane ning madalale sinine värv.



Joonis 8. ETA_Psi_1 vs P_VSA_ppp_A treeningkomplektil

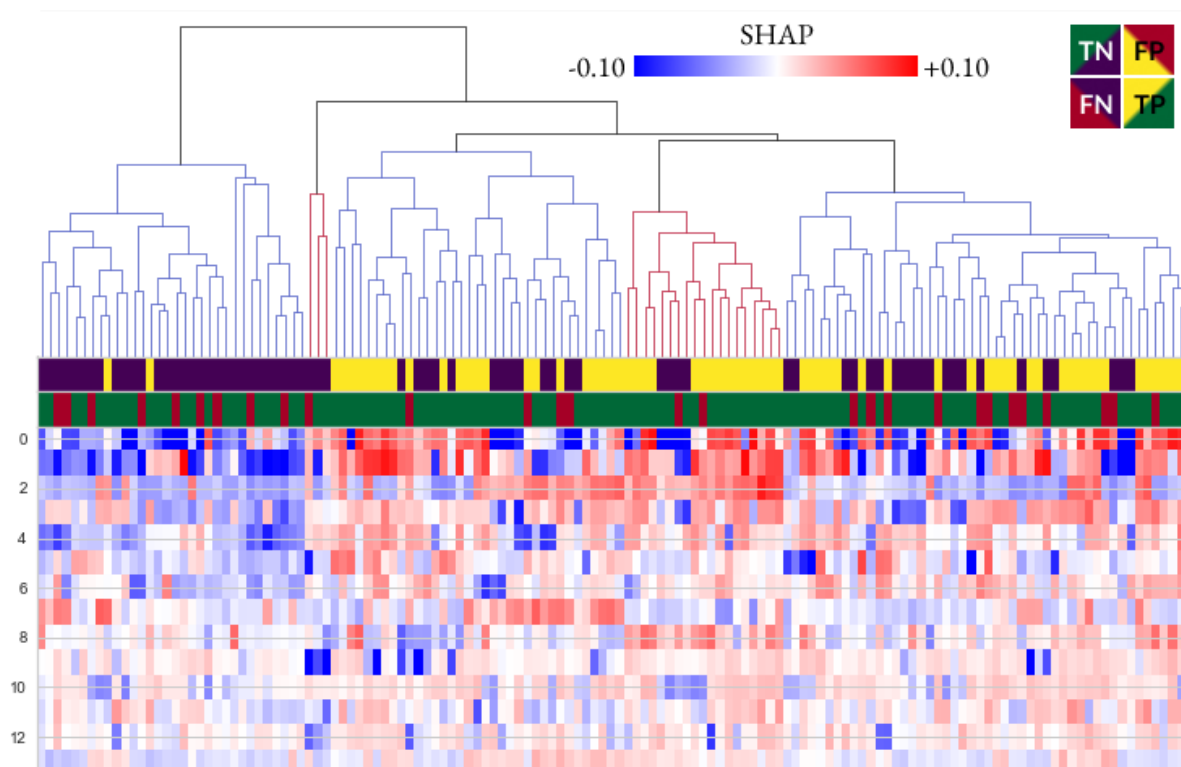


Joonis 9. Kolm suurima P_VSA_ppp_A väärtusega ühendit treeningkomplektis.

472 ehk etüleendiamiintetraädikhappe toksilisusmehhanism inimestes on hästi uuritud ning olemuselt küllaltki üldine (kindlate mikroelementide kelaatimine), et sama mehhanismiga põhjustada toksilisust ka lihtsamates organismides, sh. vihmauslased ja *Eisenia fetida*. **555** ja **786** on sulfonüüluureate sekka kuuluvad herbitsiidid. Lugesdes kelaativaid ühendeid võrdlemisi kergesti äratuntavateks ja unikaalseteks ühenditeks, võib tõmmata erandiga toksilisuspiiri $P_VSA_ppp_A = 180\text{Å}$ juurde

SpDiam_EA(bo) kirjeldab kordsete sidemete osakaalu molekulis. Suure kordsete sidemete arvuga molekulid on tõenäolisemad sobituma mõne ksenobiootikume lagundava ensüümi substraadiks. Suurt GATS1m väärtust omavad ühendid, kus on palju üksteisele lähedaste aatommassidega kõrvutiasetsevad aatompaares. GATS1m deskriptori otstarve ennustuses on tõenäoliselt lipofiilsete ühendite hulgast eristada süsivesinikulisi ja funktsionaliseeritud ühendeid. acc_N_5Bc (aktseptoraatomitele on akumulunud negatiivne osalaeng) ja don_O_2B efektid võivad olla sarnased eelmainitud P_VSA_ppp_A efektiga, ent don_O_2B puhul võib viidata ka kindlate funktsionaalrühmade nagu ester-, amiid- või sulfoonamiidrühmade esinemisele mittetoksilistes ühendites. Morse deskriptorid Mor26m ja Mor22p, GETAWAY deskriptorid R6uplus ja R6v+ koos RDF30s deskriptoriga on tõenäoliselt seotud mingisuguste konformatsiooniliste asendite leidumisele ühendite geomeetrias, mis inhibeerivad eluks olulisi ensüüme vihmaussis. Kindlate konformatsioonide tuvastamine vajaks täpsustavaid arvutusi.

Joonisel 10 on toodud testkomplekti klasterdamise dendrogramm koos ennustatud klassi, ennustuse tõesuse ning deskriptori mõjuga ennustustulemustele. Jooniselt on näha, et viiest klastrist ühes toimub suur osa (9 18-st) valenegatiivsetest ennustustest. Nende 9 ühendi puhul on



Joonis 10. Testkomplekti dendrogramm. Dendrogrammi iga tipmine haru vastab ühele ühendile testkomplektis. Kollase/lillaga ribal on toodud ühendi ennustuse tulemus vastavalt toksiliseks/mittetoksiliseks. Rohelise ja punasega vertikaalsel ribal on toodud ühendile tehtud ennustuse õigsus. Alumise maatriksi veerud vastavad samuti ühenditele, maatriksi read vastavad deskriptoritele ning värviga on toodud Shapley väärtus.

täheldatavad kõrged P_VSA_ppp_A väärtused ja madalad X3A väärtused, mis ei lange kokku treeningkomplekti enamushääletusega.

4.3 Väljajäänud andmekomplekt

Test- ja treeningkomplektist kõrvale jäetud ühendid on toodud Lisades, Tabel S3 koos neile tehtud klassifitseerimismudeli ennustustega ja eksperimentaalsete LC_{50} väärtustega. Väljajäänud andmekomplekti 182 ühendist ennustati 118 mittetoksiliseks ja 64 toksiliseks.

5 Kokkuvõte

Käesolevas töös loodi ja valideeriti akuutse toksilisuse ennustamise mudel organismile *Eisenia fetida*. 14 deskriptorit kasutav klassifitseerimismudel loodi kasutades otsustuspuudest koosnevat juhumetsa. Deskriptorid valiti esialgse 3846 hulgast geneetilise algoritmiga. Mudeli valideerimiseks kasutati nii sisemisi kui välimisi valideerimismeetodeid, mis kinnitasid head ennustus- ja üldistusvõimet. Ühtlasi ületab mudel kvaliteedimeetrikatelt seni kirjanduses publitseeritud, ent ka kinnitab teiste autorite leide. Selles töös tuvastati tähtsamad *Eisenia fetida* akuutset toksilisust kujundavad molekulaarsed omadused nagu vesiniksidemete doonorite ja aktseptorite osakaal ning paiknemine molekulis deskriptorite P_VSA_ppp_A, don_O_2 ja acc_N_5Bc näol; ahela hargevus ja struktuursete fragmentide esinemine deskriptori X3A näol; kordsete sidemete osakaal molekulis deskriptori SpDiam_EA(bo) näol. Ühtlasi selgus andmetest ka erandlik toksilisuspiir vesiniksideme aktseptoraatomite molekulaarpindala osas, mille väärtus on 180Å. Geomeetriliste deskriptorite täpne mõju ja seos ühendite võimalike toksilisusmehhanismidega jäi töö käigus lahtiseks ning selle välja selgitamist on plaanitud koos regressioonimudeli välja töötamisega samal andmekomplektil.

6 Summary

In this work, a computational model was created and validated for the prediction of acute toxicity of pesticides on *Eisenia fetida*. The classification problem was solved by using the random forest algorithm with 14 molecular descriptors, which were chosen from the initial set of 3846 by implementing a customized genetic algorithm. Both internal and external methods were used for the validation of said model, confirming the predictive and generalization power of the model. This model outperforms the existing one in both aspects, but also further confirms some of the findings of previous authors. The most important molecular features discovered were: the ratio and placement of hydrogen bond acceptors and donors in the molecule, described by the descriptors P_VSA_ppp_A, don_O_2 and acc_N_5Bc; chain branching and existence of structural fragments expressed as X3A; the ratio of double bonds in the molecule as SpDiam_EA(bo). A key takeaway is also the apparent nontoxicity of almost all chemical classes of compounds exceeding hydrogen bond acceptor surface area of 180Å. As a future task, the relation of some geometrical descriptors to toxicity mechanism remains unsolved, which is planned along with solving the regression problem for the same set of compounds.

viited

- (1) Sharma, A. *et al.* Worldwide pesticide usage and its impacts on ecosystem. *SN Applied Sciences* **2019**, *1*, 1–16.
- (2) Costa, L.; Aschner, M. Toxicology of Pesticides. *Reference Module in Biomedical Sciences* **2014**, DOI: 10.1016/B978-0-12-801238-3.00208-7.
- (3) Culleen L E Pesticide registration in the United States: overview and new directions. *Qual Assur.* **1994**, *3*, 291–299.
- (4) Riigi Teataja, *Taimekaitseadus*; <https://www.riigiteataja.ee/akt/TaimKS>: Uuendatud: 01/01/2021.
- (5) Aktar, W.; Sengupta, D.; Chowdhury, A. Impact of pesticides use in agriculture: their benefits and hazards. *Interdisciplinary Toxicology* **2009**, *2*, 1.
- (6) Mnif, W.; Hassine, A. I. H.; Bouaziz, A.; Bartegi, A.; Thomas, O.; Roig, B. Effect of Endocrine Disruptor Pesticides: A Review. *International Journal of Environmental Research and Public Health* **2011**, *8*, 2265.
- (7) Bassil, K. L.; Vakil, C.; Sanborn, M.; Cole, D. C.; Kaur, J. S.; Kerr, K. J. Cancer health effects of pesticides: Systematic review. *Canadian Family Physician* **2007**, *53*, 1704.
- (8) Repetto, R.; Baliga, S. S. Pesticides and immunosuppression: the risks to public health. *Health policy and planning* **1997**, *12*, 97–106.
- (9) Chagnon, M.; Kreutzweiser, D.; Mitchell, E. A. D.; Morrissey, C. A.; Noome, D. A.; Van Der Sluijs, J. P.; Chagnon, M.; Kreutzweiser, D.; Mitchell, E. A.; Morrissey, C. A.; Noome, D. A.; Van Der Sluijs, J. P. Risks of large-scale use of systemic insecticides to ecosystem functioning and services. *Environmental Science and Pollution Research* **2014**, *22*, 119–134.
- (10) Woodcock, B. A.; Isaac, N. J.; Bullock, J. M.; Roy, D. B.; Garthwaite, D. G.; Crowe, A.; Pywell, R. F. Impacts of neonicotinoid use on long-term population changes in wild bees in England. *Nature Communications* **2016**, *7*, 1–8.
- (11) Iyaniwura, T. T. Non-Target and Environmental Hazards of Pesticides. *Reviews on Environmental Health* **1991**, *9*, 161–176.
- (12) Amir Shafeeque, M.; Ahmad, F.; Kamal, A. Toxicity of pesticides to plants and non-target organism: a comprehensive review. *Iranian Journal of Plant Physiology*, *10*, 3299–3313.

- (13) Savigny, *Catalogue of Life : Eisenia fetida* (Savigny, 1826); <http://www.catalogueoflife.org/annual-checklist/2019/details/species/id/747f08e6625bd7305b38274efe605b4e>: Alla laetud: 13/12/2021.
- (14) Infoleht, *EELIS Infoleht*; https://infoleht.keskkonnainfo.ee/default.aspx?state=7;1389049207;est;eelisand;;&comp=objresult=lnim&obj_id=822820479: Alla laetud 13/12/2021.
- (15) Hille, R., *Eisenia foetida* R.H. [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Eisenia_foetida_R.H._\(7\).JPG](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Eisenia_foetida_R.H._(7).JPG): Alla laetud: 12/12/2021, 2014.
- (16) Singh, J. Role of Earthworm in Sustainable Agriculture. *Sustainable Food Systems from Agriculture to Industry* **2018**, 83–122.
- (17) Boedeker, W.; Watts, M.; Clausen, P.; Marquez, E. The global distribution of acute unintentional pesticide poisoning: estimations based on a systematic review. *BMC Public Health* 2020 20:1 **2020**, 20, 1–19.
- (18) Miglani, R.; Bisht, S. S. World of earthworms with pesticides and insecticides. *Interdisciplinary Toxicology* **2019**, 12, 71.
- (19) Van Groenigen, J. W.; Lubbers, I. M.; Vos, H. M.; Brown, G. G.; De Deyn, G. B.; Van Groenigen, K. J. Earthworms increase plant production: a meta-analysis. *Scientific Reports* 2014 4:1 **2014**, 4, 1–7.
- (20) Römcke, J.; Jänsch, S.; Didden, W. The use of earthworms in ecological soil classification and assessment concepts. *Ecotoxicology and Environmental Safety* **2005**, 62, 249–265.
- (21) Ma, W. c.; Bodt, J. Differences in toxicity of the insecticide chlorpyrifos to six species of earthworms (Oligochaeta, Lumbricidae) in standardized soil tests. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology* 1993 50:6 **1993**, 50, 864–870.
- (22) Yasmin, S.; D'Souza, D. Effects of Pesticides on the Growth and Reproduction of Earthworm: A Review. *Applied and Environmental Soil Science* **2010**, 2010, 1–9.
- (23) Cláudia, A.; De Lima, R.; Brussaard, L. Earthworms as soil quality indicators: local and scientific knowledge in rice management systems. *Acta Zoológica Mexicana (n.s.) Número Especial* **2010**, 2.
- (24) International Organization for Standardization, *ISO 11268-1:2012(en), Soil quality — Effects of pollutants on earthworms — Part 1: Determination of acute toxicity to Eisenia fetida/Eisenia andrei*, 2012.

- (25) *Test No. 207: Earthworm, Acute Toxicity Tests*; OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 2; https://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-207-earthworm-acute-toxicity-tests_9789264070042-en; Alla laetud: 13/12/2021, 1984.
- (26) *Test No. 222: Earthworm Reproduction Test (Eisenia fetida/Eisenia andrei)*; OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 2; https://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-222-earthworm-reproduction-test-eisenia-fetida-eisenia-andrei_9789264264496-en; Alla laetud: 13/12/2021, 2016.
- (27) Newman, M. C., *Fundamentals of Ecotoxicology*, 3. väljaanne; Taylor & Francis: Virginia, USA, 2010, lk. 1–571.
- (28) Muratov, E. N. *et al.* QSAR without borders. *Chemical Society Reviews* **2020**, 49, 3525–3564.
- (29) Dearden, J. C. The history and development of quantitative structure- activity relationships (QSARS). *Oncology: Breakthroughs in Research and Practice* **2016**, 1-2, 67–117.
- (30) Ban, F.; Dalal, K.; Li, H.; LeBlanc, E.; Rennie, P. S.; Cherkasov, A. Best Practices of Computer-Aided Drug Discovery: Lessons Learned from the Development of a Preclinical Candidate for Prostate Cancer with a New Mechanism of Action. *Journal of Chemical Information and Modeling* **2017**, 57, 1018–1028.
- (31) Alves, V. M.; Muratov, E. N.; Zakharov, A.; Muratov, N. N.; Andrade, C. H.; Tropsha, A. Chemical toxicity prediction for major classes of industrial chemicals: Is it possible to develop universal models covering cosmetics, drugs, and pesticides? *Food and chemical toxicology : an international journal published for the British Industrial Biological Research Association* **2018**, 112, 526–534.
- (32) Grzybowski, B. A.; Szymkuć, S.; Gajewska, E. P.; Molga, K.; Dittwald, P.; Wołos, A.; Klucznik, T. Chematica: A Story of Computer Code That Started to Think like a Chemist. *Chem* **2018**, 4, 390–398.
- (33) Gad, S. C. QSAR. *Encyclopedia of Toxicology: Third Edition* **2014**, 1–9.
- (34) Dehmer, M.; Varmuza, K.; Bonchev, D., *Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR*; Wiley-VCH: 2012; köide 2, lk. 39–44.

- (35) Roy, K.; Kar, S.; Das, R. N., *Understanding the Basics of QSAR for Applications in Pharmaceutical Sciences and Risk Assessment*, 1. väljaanne; Elsevier Inc.: 2015, lk. 53–61.
- (36) Ghosh, S.; Ojha, P. K.; Carnesecchi, E.; Lombardo, A.; Roy, K.; Benfenati, E. Exploring QSAR modeling of toxicity of chemicals on earthworm. *Ecotoxicology and Environmental Safety* **2020**, *190*, 110067.
- (37) Roy, J.; Kumar Ojha, P.; Carnesecchi, E.; Lombardo, A.; Roy, K.; Benfenati, E. First report on a classification-based QSAR model for chemical toxicity to earthworm. *Journal of Hazardous Materials* **2020**, *386*, 121660.
- (38) Kotu, V.; Deshpande, B., *Data science : concepts and practice*, 2. väljaanne; Morgan Kaufmann: 2018.
- (39) Guha, R. On the interpretation and interpretability of quantitative structure-activity relationship models. *Journal of Computer-Aided Molecular Design* **2008**, *22*, 857–871.
- (40) Lundberg, S. M.; Lee, S. I. A Unified Approach to Interpreting Model Predictions. *Advances in Neural Information Processing Systems* **2017**, *2017-December*, 4766–4775.
- (41) Shapley, L. S., *Notes on the n-Person Game – II: The Value of an n-Person Game*; RAND Corporation: Santa Monica, Calif., 1951.
- (42) Kumar, A.; Zhang, K. Y. Advances in the development of shape similarity methods and their application in drug discovery. *Frontiers in Chemistry* **2018**, *6*, 315.
- (43) Lewis, K. A.; Tzilivakis, J.; Warner, D. J.; Green, A. An international database for pesticide risk assessments and management. <http://dx.doi.org/10.1080/10807039.2015.1133242> **2016**, *22*, 1050–1064.
- (44) *NCI/CADD Chemical Identifier Resolver*; <https://cactus.nci.nih.gov/chemical/structure>: Alla laetud: 15/12/2021.
- (45) Kim, S.; Thiessen, P. A.; Cheng, T.; Yu, B.; Bolton, E. E. An update on PUG-REST: RESTful interface for programmatic access to PubChem. *Nucleic Acids Research* **2018**, *46*, W563.
- (46) *RDKit: Open-source cheminformatics*; <https://www.rdkit.org/>: Alla laetud: 15/12/2021.
- (47) Halgren, T. A. MMFF VI. MMFF94s Option for Energy Minimization Studies. *Journal of Computational Chemistry* **1999**, *20*, 720–729.

- (48) Sushko, I. *et al.* Online chemical modeling environment (OCHEM): web platform for data storage, model development and publishing of chemical information. *Journal of computer-aided molecular design* **2011**, 25, 533–554.
- (49) Tetko, I. V.; Gasteiger, J.; Todeschini, R.; Mauri, A.; Livingstone, D.; Ertl, P.; Palyulin, V. A.; Radchenko, E. V.; Zefirov, N. S.; Makarenko, A. S.; Tanchuk, V. Y.; Prokopenko, V. V. Virtual computational chemistry laboratory—design and description. *Journal of computer-aided molecular design* **2005**, 19, 453–463.
- (50) Mauri, A. alvaDesc, A Tool to Calculate and Analyze Molecular Descriptors and Fingerprints. *Methods in Pharmacology and Toxicology* **2020**, 801–820.
- (51) United States Environmental Protection Agency Toxicity Estimation Software Tool (TEST).
- (52) Venkatraman, V.; Alsberg, B. K. KRAKENX: software for the generation of alignment-independent 3D descriptors. *Journal of Molecular Modeling* **2016**, 22, 1–8.
- (53) Stewart, J. J. P., *MOPAC2016*; <http://openmopac.net/MOPAC2016.html>: Alla laetud 14/12/2021.
- (54) Hall, L. H.; Kier, L. B. Electrotopological State Indices for Atom Types: A Novel Combination of Electronic, Topological, and Valence State Information. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **1995**, 35, 1039–1045.
- (55) Masand, V. H.; Rastija, V. PyDescriptor: A new PyMOL plugin for calculating thousands of easily understandable molecular descriptors. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* **2017**, 169, 12–18.
- (56) Kennard, R. W.; Stone, L. A. Computer Aided Design of Experiments. *Technometrics* **1969**, 11, 137–148.
- (57) Cai, J.; Luo, J.; Wang, S.; Yang, S. Feature selection in machine learning: A new perspective. *Neurocomputing* **2018**, 300, 70–79.
- (58) Blum, A. L.; Langley, P. Selection of relevant features and examples in machine learning. *Artificial Intelligence* **1997**, 97, 245–271.
- (59) Cetin, U.; Gundogmus, Y. E. Feature Selection with Evolving, Fast and Slow Using Two Parallel Genetic Algorithms. *UBMK 2019 - Proceedings, 4th International Conference on Computer Science and Engineering* **2020**, 699–703.

- (60) Fortin, F.-A.; Marc-André Gardner, U.; Parizeau, M.; Gagné, C. DEAP: Evolutionary Algorithms Made Easy François-Michel De Rainville. *Journal of Machine Learning Research* **2012**, *13*, 2171–2175.
- (61) Pedregosa, F. *et al.* Scikit-learn: Machine Learning in Python. *Journal of Machine Learning Research* **2011**, *12*, 2825–2830.
- (62) Lundberg, S. M.; Erion, G.; Chen, H.; DeGrave, A.; Prutkin, J. M.; Nair, B.; Katz, R.; Himmelfarb, J.; Bansal, N.; Lee, S.-I. From local explanations to global understanding with explainable AI for trees. *Nature Machine Intelligence* *2020 2:1* **2020**, *2*, 56–67.

Lisad

Tabel S1. Klassifitseerimismudeli treeningkomplekt

Nr	ID	Nimi	SMILES	LD ₅₀ $\left[\frac{mg}{kg}\right]$	Teg.	Enn.
3	1421.htm	(2,2-difluoro-benzo(1,3)dioxol-4-carboxylic acid	<chem>O=C(O)c1cccc2c1OC(F)(F)O2</chem>	794	toksiline	toksiline
6	869.htm	(2E)-2-(methoxyimino)-2-{2-[(2-methylphenoxy)methyl]phenyl}acetic acid	<chem>CO/N=C(/C(=O)O)c1ccccc1COc1ccccc1C</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
12	857.htm	(4-trifluoromethoxy)phenyl urea	<chem>N=C(O)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1</chem>	562.1	toksiline	toksiline
14	698.htm	(E)-2-(2-(6-(2-cyanophenoxy)pyrimidin-4-yloxy)phenyl)-3-methoxyacrylic acid	<chem>CO/C=C(/C(=O)O)c1ccccc1Oc1cc(Oc2ccccc2C#N)ncn1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
15	993.htm	(E)-2-(4-chlorobenzylidene)-5,5-dimethyl-1-((1H)-1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-cyclopentan-1,3-diol	<chem>CC1(C)CC(O)/C(=C2ccc(Cl)cc2)C1(O)Cn1cncn1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
16	989.htm	(E,E)-trifloxystrobin acid	<chem>CON=C(C(=O)O)c1ccccc1CON=C(C)c1ccccc1C(F)(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
18	719.htm	(RS)-2-chloro-3-(2-chloro-5-(4-difluoromethyl)-4,5-dihydro-3-methyl-5-oxo-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-4-fluorophenylpropionic acid	<chem>Cc1nn(-c2cc(Cc(Cl)C(=O)O)c(Cl)cc2F)c(=O)n1C(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
19	1737.htm	(RS)2-phenylcarbamoyl-propionic acid	<chem>CC(C(=O)O)C(=O)Nc1ccccc1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
20	788.htm	(S)-5-methyl-2-methylthio-3-(2-nitrophenylamino)-5-phenyl-3,5-dihydroimidazol-4-one	<chem>CSC1=N[C@@](C)(C(=O)Nc1ccccc1)[N+](=O)[O-]</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
22	787.htm	(S)-5-methyl-5-phenylimidazolidine-2,4-dione	<chem>CC1(c2ccccc2)NC(=O)N[11C]1=O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
25	2147.htm	(Z)-3-(difluoromethyl)-N-[11-(2-hydroxypropan-2-yl)tricyclo[6.2.1.0 ^{2,7}]undeca-2(7),3,5-trien-3-yl]-1-methyl-1H-pyrazole-4-carboximidic acid	<chem>Cn1cc(C(O)=Nc2ccccc3c2C2CCC3C2C(C)(C)O)c(C(F)F)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
26	889.htm	[(2,6-dimethylphenyl)((1H-pyrazol-1-yl)methyl]carbamoylformic acid	<chem>Cc1ccccc1C1N(Cn1cccn1)C(=O)C(=O)O</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
27	2525.htm	[methyl(oxo){1-[6-(trifluoromethyl)pyridin-3-yl]ethyl}-lambda ⁶ -sulfanylidene]urea	<chem>CC(c1ccc(C(F)(F)F)nc1)S(C)(=O)=NC(=N)O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
29	1043.htm	1-(2-(2-chloro-4-(4-chloro-phenoxy)-phenyl)-2-1H-(1,2,4)triazol-yl)-ethanol	<chem>OCC(c1nc[nH]n1)c1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2)cc1Cl</chem>	312	toksiline	toksiline
35	804.htm	1-(4,6-dimethoxypyrimidin-2-yl)-1-(3-trifluoromethyl-2-pyridyl)urea	<chem>COc1cc(OC)nc(N(C(N)=O)c2ncccc2C(F)(F)F)n1</chem>	> 1250	mittetoksiline	mittetoksiline
38	2178.htm	1-(carbamoylamidino)-3-(2-trifluoromethyl-benzenesulfonyl) urea	<chem>N=C(NC(N)=O)NC(=O)NS(=O)(=O)c1ccccc1C(F)(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
39	902.htm	1,2-benzisothiazol-3(2H)-one,1,1-dioxide	<chem>O=S1(=O)N=C(O)c2ccccc21</chem>	1	toksiline	mittetoksiline
40	1361.htm	1,2-benzisothiazolin-3-one	<chem>O=c1[nH]sc2ccccc12</chem>	278	toksiline	toksiline
41	2180.htm	1-amidino-3-(2-trifluoromethyl-benzenesulfonyl) urea	<chem>N=C(N)NC(=O)NS(=O)(=O)c1ccccc1C(F)(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
46	714.htm	1-naphthol	<chem>Oc1ccccc2ccccc12</chem>	> 17.8	toksiline	toksiline
50	2901.htm	2-(((R)-1-Carboxy-ethyl)-(2-methoxy-acetyl)-amino)-3-methyl-benzoic acid	<chem>COCC(=O)N(c1c(C)ccccc1C(=O)O)[C@H](C)C(=O)O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
52	771.htm	2-((2,4-dimethyl-3-thienyl)-((1S)-2-methoxy-1-methyl-ethyl)amino)-2-oxo-acetic acid	<chem>COC[C@H](C)N(C(=O)C(=O)O)c1c(C)csc1C</chem>	> 1264	mittetoksiline	mittetoksiline
53	772.htm	2-((2,4-dimethyl-3-thienyl)-((1S)-2-methoxy-1-methyl-ethyl)amino)-2-oxo-ethanesulfonic acid	<chem>COC[C@H](C)N(C(=O)CS(=O)(=O)O)c1c(C)csc1C</chem>	> 1264	mittetoksiline	mittetoksiline
54	1735.htm	2-((2-ethyl-6-methylphenyl)	<chem>CCc1ccccc(C)c1N(COC(C)C)C(=O)CS(=O)(=O)O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
56	1239.htm	2-((carbamimidoylcarbamoyl)sulfamoyl)-N,N-dimethylpyridine-3-carboxamide	<chem>CN(C)C(=O)c1ccccc1S(=O)(=O)NC(=O)NC(=N)N</chem>	> 1250	mittetoksiline	mittetoksiline
57	1432.htm	2-((carbamoylcarbamoyl)sulfamoyl)-N,N-dimethylpyridine-3-carboxamide	<chem>CN(C)C(=O)c1ccccc1S(=O)(=O)NC(=O)NC(N)=O</chem>	> 1250	mittetoksiline	mittetoksiline
58	2536.htm	2-((dimethylamino)carbonyl)phenyl sulfamic acid	<chem>CN(C)C(=O)c1ccccc1NS(=O)(=O)O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
59	774.htm	2-([2-[(E)-(methoxyimino)(methylcarbamoyl)methyl]phenyl]methoxy)-4-methylbenzoic acid	<chem>CN=C(O)/C(=N/OC)c1ccccc1COc1cc(C)ccc1C(=O)O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
60	1230.htm	2-(1-carbamoyl-1,2-dimethyl-propylcarbamoyl)-quinoline-3-carboxylic acid	<chem>CC(C)C(C)(NC(=O)c1nc2ccccc2cc1C(=O)O)C(N)=O</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
61	938.htm	2-(1-chlorocyclopropyl)-1-(2-chlorophenyl)-3-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol	<chem>OC(Cc1ccccc1Cl)(Cn1cncn1)C1(Cl)CC1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
62	937.htm	2-(1-chlorocyclopropyl)-1-(2-chlorophenyl)-3-(4,5-dihydro-5-methylthio-1,2,4-triazolyl-1)-propan-2-ol	<chem>CSC1N=CNN1CC(O)(Cc1ccccc1Cl)C1(Cl)CC1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
64	1037.htm	2-(2,4-dichlorophenyl)-3-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propanoic acid	<chem>O=C(O)C(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	> 250	toksiline	toksiline
65	932.htm	2-(3,5-dichlorophenyl)-4,4-dimethyl-5-methylene-oxazoline	<chem>C=C1OC(c2cc(Cl)cc(Cl)c2)=NC1(C)C</chem>	> 86.8	toksiline	toksiline
66	2493.htm	2-(3-bromo-1-(3-chloro-2-pyridinyl)-1H-pyrazol-5-yl)-6-chloro-3,8dimethyl-4(3H)-quinazolinone	<chem>Cc1cc(Cl)cc2c(=O)n(C)c(-c3cc(Br)nn3-c3ncccc3Cl)nc12</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline

68	2695.htm	2-(3-bromo-1-(3-chloropyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl)-3,8-dimethyl-4-oxo-3,4-dihydroquinazoline-6-carboxamide	<chem>Cc1cc(C(N)=O)cc2c(=O)n(C)c(-c3cc(Br)nn3-c3ncccc3Cl)nc12</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
71	2006.htm	2-(4-tert-butylphenyl)-3-oxo-3-[2-(trifluoromethyl)phenyl]propanenitrile	<chem>CC(C)(C)c1ccc(C(C#N)C(=O)c2ccccc2C(F)(F)F)cc1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
72	1608.htm	2-(6-(2-cyanophenoxy)pyrimidin-4-yloxy)benzoic acid	<chem>N#Cc1ccccc1Oc1cc(Oc2ccccc2C(=O)O)ncn1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
73	911.htm	2-(ethanesulfinyl)ethane-1-sulfonic acid	<chem>CCS(=O)CCS(=O)(=O)O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
75	2005.htm	2-(trifluoromethyl)benzoic acid	<chem>O=C(O)c1ccccc1C(F)(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
76	1141.htm	2,3,3-trichloro-2-propene sulfonic acid	<chem>O=S(=O)(O)CC(Cl)=C(Cl)Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
78	1584.htm	2,3-difluoro-6-trifluoromethylbenzamidine	<chem>N=C(N)c1c(C(F)(F)F)ccc(F)c1F</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
81	4.htm	2,4-D	<chem>O=C(O)COc1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	350	toksiline	toksiline
82	5.htm	2,4-DB	<chem>O=C(O)CCCOc1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
83	2691.htm	2,4-dichloro-1-methoxybenzene	<chem>COc1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	> 50.9	toksiline	toksiline
84	741.htm	2,4-dichloroaniline	<chem>Nc1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	142	toksiline	toksiline
86	762.htm	2,4-dichlorophenol	<chem>Oc1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	> 4.4	toksiline	toksiline
87	250.htm	2,4-dinitro-6-(octan-2-yl)phenyl but-2-enoate	<chem>CC=CC(=O)Oc1c(C(C)CCCCC)cc([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]</chem>	60	toksiline	toksiline
88	1054.htm	2,5-dichloro-4-(1,1,2,3,3,3-hexafluoro-propoxy)-phenylamine	<chem>Nc1cc(Cl)c(OC(F)(F)C(F)C(F)(F)F)cc1Cl</chem>	> 265	toksiline	toksiline
91	816.htm	2,6-dichloro-N-[[3-chloro-5-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl](hydroxy)methyl]benzamide	<chem>OC(=NC(O)c1ncc(C(F)(F)F)cc1Cl)c1c(Cl)cccc1Cl</chem>	500	toksiline	mittetoksiline
92	768.htm	2,6-difluorobenzoic acid	<chem>O=C(O)c1c(F)cccc1F</chem>	500	toksiline	toksiline
93	2146.htm	2,6-dimethoxybenzamide	<chem>COc1ccccc(OC)c1C(N)=O</chem>	> 54.2	toksiline	toksiline
94	2538.htm	2-[[[(4-hydroxy-6-methoxypyrimidin-2-yl)carbamoyl]amino]sulfonyl]amino]-N,N-dimethylbenzamide	<chem>COc1cc(O)nc(N=C(O)NS(=O)(=O)Nc2ccccc2C(=O)N(C)C)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
96	2495.htm	2-[3-bromo-1-(3-chloropyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]-6-chloro-8-methyl-3,4-dihydroquinazolin-4-one	<chem>Cc1cc(Cl)cc2c(O)nc(-c3cc(Br)nn3-c3ncccc3Cl)nc12</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
97	745.htm	2-[[[(E)-(6-tert-butyl-2,3-difluorophenyl)(cyclopropyl methoxy)imino]methyl]carbamoyl]acetic acid	<chem>CC(C)(C)c1ccc(F)c(F)c1C(N=C(O)CC(=O)O)=NOCC1CC1</chem>	500	toksiline	mittetoksiline
99	2382.htm	2-[7-amino-5-ethyl-1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin-6-yl]acetic acid	<chem>CCc1nc2ncnn2c(N)c1CC(=O)O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
100	1102.htm	2-amido-3,5,6-trichlo-4-cyanobenzenesulphonic acid	<chem>N#Cc1c(Cl)c(Cl)c(S(=O)(=O)O)c(C(=N)O)c1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
102	1490.htm	2-amino-2-(4-tert-butyl-2-ethoxyphenyl)ethyl 2,6-difluorobenzoate	<chem>CCOc1cc(C(C)(C)C)ccc1C(N)COC(=O)c1c(F)cccc1F</chem>	> 9.6	toksiline	toksiline
104	2181.htm	2-amino-4-methoxy-6-(trifluoromethyl)-1,3,5-triazine	<chem>COc1nc(N)nc(C(F)(F)F)n1</chem>	671	toksiline	toksiline
105	1092.htm	2-amino-4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazine	<chem>COc1nc(C)nc(N)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
107	1222.htm	2-chloro-4-(methylsulfonyl)-3-((2,2,2-trifluoroethoxy)methyl)phenol	<chem>CS(=O)(=O)c1ccc(O)c(Cl)c1COCC(F)(F)F</chem>	250	toksiline	mittetoksiline
108	1221.htm	2-chloro-4-(methylsulfonyl)-3-((2,2,2-trifluoroethoxy)methyl)-benzoic acid	<chem>CS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)O)c(Cl)c1COCC(F)(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
109	1009.htm	2-chloro-4-methylsulfonyl-benzoic acid	<chem>CS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)O)c(Cl)c1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
110	1414.htm	2-chloro-5-(4-(difluoromethyl)-3-methyl-5-oxo-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-4-fluorobenzoic acid	<chem>Cc1nn(-c2cc(C(=O)O)c(Cl)cc2F)c(=O)n1C(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
112	1091.htm	2-chlorobenzenesulfonamide	<chem>NS(=O)(=O)c1ccccc1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
113	1243.htm	2-chlorobenzoic acid	<chem>O=C(O)c1ccccc1Cl</chem>	21.5	toksiline	toksiline
115	920.htm	2-dimethylamino-5,6-dimethylpyrimidin-4-ol	<chem>Cc1nc(N(C)C)nc(O)c1C</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
120	1182.htm	2-methyl-2-(4-(2-methyl-3-piperidin-1-yl-propyl)-phenyl)-propionic acid	<chem>CC(Cc1ccc(C(C)(C)C(=O)O)cc1)CN1CCCCC1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
122	841.htm	2-methylphosphinico-acetic acid	<chem>CC(C(=O)O)=[P+](O-)=O</chem>	760	toksiline	mittetoksiline
125	1340.htm	2-phenylphenol	<chem>Oc1ccccc1-c1ccccc1</chem>	99.1	toksiline	toksiline
126	1015.htm	2-propoxy-3-propylquinazolin-4(3H)-one	<chem>CCCOC1nc2ccccc2c(=O)n1CCC</chem>	> 100	toksiline	toksiline
127	2179.htm	2-trifluoromethyl-benzenesulfonamide	<chem>NS(=O)(=O)c1ccccc1C(F)(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
129	773.htm	3-([2-[(E)-(methoxyimino)(methylcarbamoyl)methyl]phenyl]methoxy)-4-methylbenzoic acid	<chem>CN=C(O)C(=N/OC)c1ccccc1COc1cc(C(=O)O)ccc1C</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
131	1267.htm	3-(2,4,6-trimethylphenyl)pentanedioic acid	<chem>Cc1cc(C)c(C(C(C)=O)O)CC(=O)O)c(C)C1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
132	1049.htm	3-(2,4-dichlorophenyl)-3,4-dihydroxy-1-oxaspiro(4.5)decan-2-one	<chem>O=C1OC2(CCCCC2)C(O)C1(O)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
133	1048.htm	3-(2,4-dichlorophenyl)-3-hydroxy-1-oxaspiro(4.5)decan-2,4-dione	<chem>O=C1OC2(CCCCC2)C(=O)C1(O)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
134	1047.htm	3-(2,4-dichlorophenyl)-4-hydroxy-1-oxaspiro(4.5)dec-3-en-2-one	<chem>O=C1OC2(CCCCC2)C(O)=C1c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
135	1261.htm	3-(2,4-dichlorophenyl)-6-fluoro-quinazolin-2,4(3H)-dione	<chem>O=c1[nH]c2ccc(F)cc2c(=O)n1-c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
138	730.htm	3-(3-chloro-p-tolyl)-1-methylurea	<chem>CNC(=O)Nc1ccc(C)cc1Cl</chem>	697	toksiline	toksiline
139	1001.htm	3-(4,5-dihydro-isoxazol-3-yl)-4-methanesulfonyl-2-methyl-benzoic acid	<chem>Cc1c(C(=O)O)ccc(S(C(=O)=O)c1Cl)=NOCC1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline

140	2491.htm	3-(4-chlorophenyl)-3-(3-methyl-2-[(propan-2-yloxy)carbonylamino]butanamido)propanoic acid	<chem>CC(C)OC(O)=NC(C(O)=NC(CC(=O)O)c1ccc(Cl)cc1)C(C)C</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
142	2148.htm	3-(difluoromethyl)-1H-pyrazole-4-carboxylic acid	<chem>O=C(O)c1c[nH]nc1C(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
143	2003.htm	3-(difluoromethyl)-1-methyl-1H-pyrazole-4-carboxylic acid	<chem>Cn1cc(C(=O)O)c(C(F)F)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
145	923.htm	3,4-dichloroaniline	<chem>Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	> 20	toksiline	toksiline
146	776.htm	3,4-dichlorophenyl urea	<chem>NC(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	801	toksiline	toksiline
148	826.htm	3,5-dichloro-2-fluoro-6-methoxypyridin-4-amine	<chem>COc1nc(F)c(Cl)c(N)c1Cl</chem>	313	toksiline	toksiline
149	2375.htm	3,5-dichloro-4-(3-((5-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl)oxy)propoxy)phenol	<chem>Oc1cc(Cl)c(OCCCCOc2ccc(C(F)F)cn2)c(Cl)c1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
152	759.htm	3,6-dichlorosalicylic acid	<chem>O=C(O)c1c(Cl)ccc(Cl)c1O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
155	1103.htm	3-carbamyl-2,4,5-trichlorobenzoic acid	<chem>NC(=O)c1c(Cl)c(Cl)ccc(C(=O)O)c1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
162	3074.htm	3-hydroxy-4-methoxypyridine-2-carboxylic acid	<chem>COc1ccnc(C(=O)O)c1O</chem>	10	toksiline	toksiline
164	1060.htm	3-hydroxymethyl-7-chloro-quinoline-8-carboxylic acid	<chem>O=C(O)c1c(Cl)ccc2cc(CO)cn12</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
165	797.htm	3-methyl-4-nitrophenol	<chem>Cc1cc(O)ccc1[N+](=O)[O-]</chem>	35	toksiline	toksiline
166	840.htm	3-methyl-phosphinico-propionic acid	<chem>CCC(C(=O)O)=[P+](O-)(O-)</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
167	1522.htm	3-nitro-N2,N2-dipropyl-5-(trifluoromethyl)benzene-1,2-diamine	<chem>CCCN(CCC)c1c(N)cc(C(F)F)Fcc1[N+](=O)[O-]</chem>	186	toksiline	toksiline
169	1647.htm	3-propylquinazoline-2,4(1H,3H)-dione	<chem>CCCN1c(=O)[nH]c2ccccc2c1=O</chem>	> 100	toksiline	toksiline
170	2477.htm	3-trifluoromethyl-1H-pyrazole-4-carboxylic acid	<chem>O=C(O)c1c[nH]nc1C(F)(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
171	805.htm	3-trifluoromethyl-2-pyridylsulfonamide	<chem>NS(=O)(=O)c1ncccc1C(F)(F)F</chem>	> 1250	mittetoksiline	mittetoksiline
175	1607.htm	4-(2-cyanophenoxy)-6-hydroxypyrimidine	<chem>N#Cc1ccccc1Oc1cc(O)ncn1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
176	1492.htm	4-(4-tert-butyl-2-ethoxyphenyl)-2-(2,6-difluorophenyl)oxazole	<chem>CCOC1cc(C(C)(C)C)ccc1-c1ccc(-c2c(F)cccc2F)n1</chem>	> 9.9	toksiline	toksiline
178	1052.htm	4-(8-hydroxy-6-oxo-5-oxaspiro[3.4]oct-7-en-7-yl)-3,5-dimethylbenzoic acid	<chem>Cc1cc(C(=O)O)cc(C1C=C(C(O)C2(CCC2)OC1=O</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
183	2800.htm	4,6-dimethoxypyrimidin-2-amine	<chem>COc1cc(OC)nc(N)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
184	882.htm	4,6-dimethoxypyrimidine-2-yl-urea	<chem>COc1cc(OC)nc(NC(N)=O)n1</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
185	843.htm	4-[[3-chloro-5-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl]oxy]phenol	<chem>Oc1ccc(Oc2ncc(C(F)(F)F)cc2Cl)cc1</chem>	280	toksiline	toksiline
186	1268.htm	4-{4-[(1E)-1-(ethoxyimino)propyl]-3-hydroxy-5-oxocyclohex-3-en-1-yl}-3,5-dimethylbenzoic acid	<chem>CCO/N=C(C)C1=C(C(O)CC(c2c(C)cc(C(=O)O)cc2C)CC1=O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
187	749.htm	4-{4-[(1R)-1-carboxyethoxy]phenoxy}-3-fluorobenzoic acid	<chem>CC(OC1ccc(Oc2cccc(C(=O)O)cc2F)cc1)C(=O)O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
189	1264.htm	4-{N'-tert-butyl-N'-[1-(3,5-dimethylphenyl)ethenyl]hydrazinecarbonyl}benzoic acid	<chem>C=C(c1cc(C)cc(C)c1)N(NC(=O)c1ccc(C(=O)O)cc1)C(C)(C)C</chem>	100	toksiline	mittetoksiline
191	825.htm	4-amino-3,5-dichloro-6-fluoro-2-pyridinol	<chem>Nc1c(Cl)c(O)nc(F)c1Cl</chem>	79	toksiline	toksiline
194	2869.htm	4-amino-3-chloro-6-(4-chloro-2-fluoro-3-hydroxyphenyl)pyridine-2-carboxylic acid	<chem>Nc1cc(-c2ccc(Cl)c(O)c2F)nc(C(=O)O)c1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
195	2164.htm	4-amino-6-(tert-butylamino)-1,3,5-triazin-2-ol	<chem>CC(C)(C)Nc1nc(=N)nc(O)[nH]1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
196	1924.htm	4-aminobenzenesulphonamide	<chem>Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
200	2159.htm	4-chloro-3-ethyl-1-methyl-5-pyrazolecarboxamide	<chem>CCc1nn(C)c(C(N)=O)c1Cl</chem>	392	toksiline	toksiline
202	739.htm	4-chloro-5-p-tolylimidazole-2-carboxamide	<chem>Cc1ccc(-c2[nH]c(C(N)=O)nc2Cl)cc1</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
203	740.htm	4-chloro-5-p-tolylimidazole-2-carboxylic acid	<chem>Cc1ccc(-c2[nH]c(C(=O)O)nc2Cl)cc1</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
204	2492.htm	4-chlorobenzoic acid	<chem>O=C(O)c1ccc(Cl)cc1</chem>	94.8	toksiline	toksiline
205	767.htm	4-chlorophenylurea	<chem>NC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1</chem>	340	toksiline	toksiline
209	1051.htm	4-hydroxy-3-mesityl-1-oxaspiro(4.4)non-3-en-2-one	<chem>Cc1cc(C)c(C2=C(O)C3(CCCC3)OC2=O)c(C)c1</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
210	892.htm	4-methanesulfinyl-3,5-dimethylphenol	<chem>Cc1cc(O)cc(C)S(C)=O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
212	999.htm	4-methoxybiphenyl	<chem>COc1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	43.6	toksiline	toksiline
213	884.htm	4-methylsulfonyl-2-nitrobenzoic acid	<chem>CS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)O)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
215	1260.htm	5-((3-chloro-5-(trifluoromethyl)-2-pyridyl)amino)-alpha,alpha,alpha-trifluoro-4,6-dinitro-o-cresol	<chem>O=[N+](O-)[O-]c1cc(C(F)(F)F)c(O)c([N+](=O)[O-])c1Nc1ncc(C(F)(F)F)cc1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
218	811.htm	5-(aminosulfonyl)-1H-1,2,4-triazole-3-carboxylic acid	<chem>NS(=O)(=O)c1nc(C(=O)O)n[nH]1</chem>	> 100	toksiline	toksiline
219	2909.htm	5-(trifluoromethyl)-1H-pyrazole-3-carboxylic acid	<chem>O=C(O)c1cc(C(F)(F)F)[nH]n1</chem>	> 100.0	toksiline	toksiline
220	2140.htm	5-(trifluoromethyl)-2(1H)-pyridinone	<chem>O=c1ccc(C(F)(F)F)c[nH]1</chem>	> 1000	mittetoksiline	toksiline
223	994.htm	5-[[[(1E,2R)-2-hydroxy-3,3-dimethyl-2-[(1H-1,2,4-triazol-1-yl)methyl]cyclopentylidene]methyl]-2-methylphenol	<chem>Cc1ccc(/C=C2(C)(C)[C@]2(O)Cn2cn2)cc1O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
225	1104.htm	5-amino-4-chloro-3(2H)-pyridazinone	<chem>Nc1cn[nH]c(=O)c1Cl</chem>	> 1132	mittetoksiline	mittetoksiline
227	2494.htm	5-bromo-N-methyl-1H-pyrazole-3-carboxamide	<chem>CNC(=O)c1cc(Br)[nH]n1</chem>	632.5	toksiline	toksiline
231	820.htm	6-[2-[(E)-(5,6-dihydro-1,4,2-dioxazin-3-yl)(methoxyimino)methyl]phenoxy]-5-fluoropyrimidin-4-ol	<chem>CO/N=C(C/C1=NOCCO1)c1cccc1Oc1ncnc(O)c1F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
234	1528.htm	6-hydroxy-4-trifluoromethylnicotinic acid	<chem>O=C(O)c1cnc(O)cc1C(F)(F)F</chem>	100	toksiline	mittetoksiline
235	1646.htm	6-iodo-3-propylquinazoline-2,4(1H,3H)-dione	<chem>CCCN1c(=O)[nH]c2ccc(I)cc2c1=O</chem>	> 100	toksiline	toksiline

236	2383.htm	7-amino-5-ethyl(1,2,4)triazolo(1,5-a)pyrimidin-6-carboxylic acid	CCc1nc2ncnn2c(N)c1C(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
238	1095.htm	7-chloro-3-(1H-imidazol-1-yl)-1,2,4-benzotriazine	Clc1ccc2nc(-n3cnc3)nnc2c1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
239	1059.htm	7-chloro-3,8-quinoline dicarboxylic acid	O=C(O)c1cnc2c(C(=O)O)c(Cl)ccc2c1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
241	918.htm	8-(2,6-diethyl-4-methylphenyl)-9-hydroxy-1H,2H,4H,5H,7H-pyrazolo[1,2-d][1,4,5]oxadiazepin-7-one	CCc1cc(C)cc(CCl)c1-c1c(O)n2n(c1=O)CCOCC2	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
243	3157.htm	8-thia-1,3,6,10-tetraazatricyclo[7.3.0.0 ^{3,7}] <i>dodeca</i> – 6, 9 – <i>diene</i> – 2 – <i>thione</i>	S=C1N2CCN=C2SC2=NCCN12	40	toksiline	toksiline
244	9.htm	Acephate	COP(=O)(NC(C)=O)SC	> 22974	mittetoksiline	mittetoksiline
245	10.htm	Acequinocyl	CCCCCCCCCCCCC1=C(OC(C)=O)C(=O)c2ccccc2C1=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
246	11.htm	Acetamidiprid	CC(=NC#N)N(C)Cc1ccc(Cl)nc1	9	toksiline	toksiline
247	12.htm	Acetochlor	CCOCN(C(=O)CCl)c1c(C)cccc1CC	105.5	toksiline	toksiline
249	819.htm	Acifluorfen	O=C(O)c1cc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	> 1800	mittetoksiline	mittetoksiline
250	14.htm	Acifluorfen-sodium	O=C([O-])c1cc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	1800	mittetoksiline	mittetoksiline
251	15.htm	Aclonifen	Nc1c([N+](=O)[O-])ccc(Oc2ccccc2)c1Cl	150	toksiline	toksiline
252	16.htm	Acrinathrin	CC1(C)C(C)C=C(C=O)OC(C(F)(F)F)C(C(F)(F)F)C1C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2ccccc2)c1	> 100	toksiline	toksiline
253	2636.htm	Afidopyropen	CC1(COC(=O)C2CC2)C(OC(=O)C2CC2)CCC2(C)C1CC(O)C1C(O)c3cc(-c4ccccc4)oc(=O)c3C(O)C21	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
254	17.htm	Alachlor	CCc1cccc(CC)c1N(COC)C(=O)CCl	386.8	toksiline	toksiline
255	19.htm	Aldicarb	CNC(=O)ON=CC(C)(C)SC	65	toksiline	toksiline
256	20.htm	Aldicarb sulfone	CNC(=O)ON=CC(C)(C)S(C)(=O)=O	0.163	toksiline	toksiline
257	21.htm	Aldrin	ClC1=C(Cl)C2(Cl)C3C4C=CC(C4)C3C1(Cl)C2(Cl)Cl	60	toksiline	toksiline
258	22.htm	Allethrin	C=CCC1=C(C)C(OC(=O)C2C(C=C(C)C)C2(C)C)CC1=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
259	2017.htm	Alpha-pinene	CC1=CCC2CC1C2(C)C	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
260	2016.htm	Alpha-terpinoline	CC1=CCC(=C(C)C)CC1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
263	28.htm	Amidosulfuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)N(C)S(C)(=O)=O)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
264	1668.htm	Aminocyclopyrachlor	Nc1nc(C2CC2)nc(C(=O)O)c1Cl	367	toksiline	mittetoksiline
266	1137.htm	Amisulbrom	Cc1c(Br)c2ccc(F)cc2n1S(=O)(=O)C1ncn(S(=O)(=O)N(C)C)n1	> 87.5	toksiline	mittetoksiline
267	30.htm	Amitraz	Cc1ccc(N=CN(C)C)C=Ne2ccc(C)cc2C)c(C)c1	1000	mittetoksiline	toksiline
268	1287.htm	Ampropylfos	CCC(N)P(=O)(O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
269	39.htm	Anilazine	Clc1nc(Cl)nc(Nc2ccccc2Cl)n1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
270	41.htm	Anthraquinone	O=C1c2ccccc2C(=O)c2ccccc21	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
273	43.htm	Atrazine	CCNc1nc(Cl)nc(NC(C)C)n1	79	toksiline	toksiline
274	49.htm	Azimsulfuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2c(-c3nnn(C)n3)cnn2C)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
276	52.htm	Aziprotryne	CSc1nc(N=[N+]=[N-])nc(NC(C)C)n1	1	toksiline	toksiline
278	58.htm	Beflubutamid	CCC(Oc1ccc(F)c(C(F)(F)F)c1)C(=O)NCc1ccccc1	366	toksiline	toksiline
279	1010.htm	Benalaxyl-M	COC(=O)C(C)N(C)C(=O)Cc1ccccc1)c1c(C)cccc1C	236	toksiline	toksiline
280	60.htm	Benazolin	O=C(O)Cn1c(=O)sc2ccc(Cl)c21	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
282	1697.htm	Bencarbazone	CCS(=O)(=O)Nc1cc(-n2nc(C(F)(F)F)n(C)c2=O)c(F)cc1C(N)=S	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
285	63.htm	Benfuracarb	CCOC(=O)CCN(SN(C)C(=O)Oc1ccccc2c1OC(C)(C)C2)C(C)C	29	toksiline	toksiline
287	66.htm	Benomyl	CCCCNC(=O)n1c(NC(=O)OC)nc2ccccc21	10.5	toksiline	toksiline
288	67.htm	Benoxacor	CC1COc2ccccc2N1C(=O)C(Cl)Cl	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
289	1552.htm	Bensulfuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)Cc2ccccc2C(=O)O)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
290	68.htm	Bensulfuron-methyl	COC(=O)c1ccccc1CS(=O)(=O)N(C(=O)Nc1nc(OC)cc(OC)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
291	69.htm	Bensulide	CC(C)OP(=S)(OC(C)C)SCNS(=O)(=O)c1ccccc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
292	70.htm	Bensultap	CN(C)C(C)CSS(=O)(=O)c1ccccc1)CSS(=O)(=O)c1ccccc1	30	toksiline	toksiline
294	72.htm	Benthiavalicarb	CC(NC(=O)C)C(NC(=O)O)C(C)C)c1nc2ccc(F)cc2s1	> 100	toksiline	mittetoksiline
296	952.htm	Benzaldehyde	O=Cc1ccccc1	60	toksiline	toksiline
298	1475.htm	Benzoic acid	O=C(O)c1ccccc1	384	toksiline	toksiline
303	704.htm	Bifenox acid	O=C(O)c1cc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
304	78.htm	Bifenthrin	Cc1c(COC(=O)C2C(C=C(Cl)C(F)(F)F)C2(C)C)cccc1-c1ccccc1	> 8.0	toksiline	toksiline
306	1018.htm	Bistrifluron	O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1F)Nc1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
307	84.htm	Bitertanol	CC(C)(C)C(O)C(OC1ccc(-c2ccccc2)cc1)n1cncn1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
308	1250.htm	Bixafen	Cn1cc(C(=O)Nc2ccc(F)cc2-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)c(C(F)F)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
312	89.htm	Bromadiolone	O=c1oc2ccccc2c(O)c1C(CC(O)c1ccc(-c2ccc(Br)cc2)cc1)c1ccccc1	> 4.74	toksiline	mittetoksiline
314	92.htm	Bromofenoxim	O=C1C(Br)=CC(=CNc2ccc([N+](=O)[O-])cc2[N+](=O)[O-])C=C1Br	1300	mittetoksiline	mittetoksiline
315	93.htm	Bromophos	COP(=S)(OC)Oc1ccc(Cl)c(Br)cc1Cl	> 85	toksiline	toksiline
316	95.htm	Bromopropylate	CC(C)OC(=O)C(O)(c1ccc(Br)cc1)c1ccc(Br)cc1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
317	96.htm	Bromoxynil	N#Cc1cc(Br)c(O)c(Br)c1	45	toksiline	toksiline
319	1061.htm	Bromoxynil heptanoate	CCCCCCC(=O)Oc1c(Br)cc(C#N)cc1Br	45	toksiline	toksiline
324	101.htm	Butachlor	CCCCOCN(C(=O)CCl)c1c(CC)cccc1CC	0.515	toksiline	toksiline
326	104.htm	Butralin	CCC(C)Nc1c([N+](=O)[O-])cc(C(C)(C)C)cc1[N+](=O)[O-]	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
331	115.htm	Carbaryl	CNC(=O)Oc1cccc2ccccc12	< 4	toksiline	toksiline
332	116.htm	Carbendazim	COC(=O)Nc1nc2ccccc2[nH]1	5.4	toksiline	toksiline

333	117.htm	Carbetamide	CCNC(=O)C(C)OC(=O)Nc1ccccc1	660	toksiline	toksiline
335	121.htm	Carbosulfan	CCCCN(CCCC)SN(C)C(=O)Oc1ccccc2c1OC(C)(C)C2	4.8	toksiline	toksiline
336	122.htm	Carboxin	CC1=C(C(=O)Nc2ccccc2)SCCO1	> 250	toksiline	toksiline
339	3123.htm	Carvone	C=C(C)C1CC=C(C)C(=O)C1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
340	127.htm	Chinomethionat	Cc1ccc2nc3sc(=O)sc3nc2c1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
341	1138.htm	Chlorantraniliprole	CNC(=O)c1cc(Cl)cc(C)c1NC(=O)c1cc(Br)nn1-c1nccccc1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
342	1293.htm	Chlordecone	O=C1C2(Cl)C3(Cl)C4(Cl)C1(Cl)C5(Cl)C3(Cl)C1(Cl)C5(Cl)C24Cl	105	toksiline	toksiline
344	138.htm	Chlorfenvinphos	CCOP(=O)(OCC)OC(=CCl)c1ccc(Cl)cc1Cl	130	toksiline	toksiline
346	140.htm	Chlorflurenol	O=C(O)C1(O)c2ccccc2-c2ccc(Cl)cc21	> 1350	mittetoksiline	mittetoksiline
347	2131.htm	Chlorflurenol methyl	COC(=O)C1(O)c2ccccc2-c2ccc(Cl)cc21	1350	mittetoksiline	mittetoksiline
348	141.htm	Chloridazon	Nc1cnn(-c2ccccc2)c(=O)c1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
349	1145.htm	Chlorimuron-ethyl	CCOC(=O)c1ccccc1S(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(Cl)cc(OC)n1	4050	mittetoksiline	mittetoksiline
353	150.htm	Chlorothalonil	N#Cc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(C#N)c1Cl	268.5	toksiline	toksiline
354	151.htm	Chlorotoluron	Cc1ccc(NC(=O)N(C)C)cc1Cl	> 1000	mittetoksiline	toksiline
355	153.htm	Chlorpropham	CC(C)OC(=O)Nc1ccccc(Cl)c1	132	toksiline	toksiline
356	154.htm	Chlorpyrifos	CCOP(=S)(OCC)Oc1nc(Cl)c(Cl)cc1Cl	129	toksiline	toksiline
362	162.htm	Cinidon-ethyl	CCOC(=O)C(Cl)=Cc1cc(N2C(=O)C3=C(C(CCC3)C2=O)ccc1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
364	163.htm	Cinosulfuron	COCCOc1ccccc1S(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(OC)nc(OC)n1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
365	2489.htm	Cis-3-(2,5-dimethylphenyl)-3-hydroxy-8-methoxy-1-azaspiro(4.5)decane-2,4-dione	COC1CCC2(CC1)NC(=O)C(O)(c1cc(C)ccc1C)C2=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
367	164.htm	Clethodim	CCSC(C)CC1CC(=O)C(C(C)C)=NOCC=CCl)=C(O)C1	65	toksiline	toksiline
369	1416.htm	Clodinafop	CC(Oc1ccc(Oc2ncc(Cl)cc2F)cc1)C(=O)O	197	toksiline	toksiline
370	165.htm	Clodinafop-propargyl	C#CCOC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2ncc(Cl)cc2F)cc1	197	toksiline	toksiline
371	166.htm	Clofencet	CCc1c(C(=O)O)c(=O)nn1-c1ccc(Cl)cc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
372	167.htm	Clofentezine	Clc1ccccc1-c1nnc(-c2ccccc2Cl)nn1	> 215	toksiline	toksiline
373	168.htm	Clomazone	CC1(C)CON(Cc2ccccc2Cl)C1=O	78	toksiline	toksiline
374	169.htm	Clopyralid	O=C(O)c1nc(Cl)ccc1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
375	3206.htm	Clopyralid methyl	COC(=O)c1nc(Cl)ccc1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
376	3208.htm	Clopyralid potassium	O=C([O-])c1nc(Cl)ccc1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
377	170.htm	Cloquintocet-mexyl	CCCCCC(C)OC(=O)COc1ccc(Cl)c2ccnc12	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
378	1153.htm	Cloransulam-methyl	CCOc1nc(F)cc2nc(S(=O)(=O)Nc3c(Cl)cccc3C(=O)OC)nn12	859	toksiline	mittetoksiline
380	185.htm	Cyanazine	CCNc1nc(Cl)nc(NC(C)C)C#Nn1	600	toksiline	toksiline
385	188.htm	Cycloate	CCSC(=O)N(C)C1CCCCC1	250	toksiline	toksiline
389	1143.htm	Cyflumetofen	COCCOC(=O)C(C#N)(C(=O)c1ccccc1C(F)(F)F)c1ccc(C(C)(C)C)cc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
390	192.htm	Cyfluthrin	CC1(C)C(C=C(Cl)Cl)C1C(=O)OC(C#N)c1ccc(F)c(Oc2ccccc2)c1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
393	193.htm	Cyhalofop-butyl	CCCCOC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2ccc(C#N)cc2F)cc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
397	199.htm	Cyprodinil	Cc1cc(C2CC2)nc(Nc2ccccc2)n1	192	toksiline	toksiline
398	200.htm	Cyromazine	Nc1nc(N)nc(NC2CC2)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
399	202.htm	Daminozide	CN(C)NC(=O)CCC(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
400	203.htm	Dazomet	CN1CSC(=S)N(C)C1	6.5	toksiline	toksiline
402	204.htm	DDT	Clc1ccc(Cc2ccc(Cl)cc2)C(Cl)(Cl)Clcc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
404	1544.htm	Demeton-O-methyl	CCSCCOP(=S)(OC)OC	> 250	toksiline	toksiline
405	206.htm	Demeton-S-methyl	CCSCCSP(=O)(OC)OC	> 250	toksiline	toksiline
406	898.htm	Desaminodiketo-metribuzin	CC(C)(C)c1nnc(O)nc1O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
409	1494.htm	Desethyl-terbuthylazine	CC(C)(C)Nc1nc(Cl)nc(=N)[nH]1	> 120	toksiline	toksiline
411	2551.htm	Desmethoxy-metobromuron	CN=C(O)Nc1ccc(Br)cc1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
413	208.htm	Desmetryn	CNc1nc(NC(C)C)nc(SC)n1	160	toksiline	toksiline
414	210.htm	Diafenthiuron	CC(C)c1cc(Oc2ccccc2)cc(C(C)C)c1NC(=S)NC(C)(C)C	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
415	703.htm	Diazinecarboxylic acid, 2-(4-methoxy-(1,1-biphenyl)-3-yl),1-methylethyl ester	COc1ccc(-c2ccccc2)cc1CC(C)OC(=O)c1cccn1	92.5	toksiline	toksiline
416	212.htm	Diazinon	CCOP(=S)(OCC)Oc1cc(C)nc(C(C)C)n1	65	toksiline	toksiline
418	214.htm	Dichlobenil	N#Cc1c(Cl)ccccc1Cl	135	toksiline	toksiline
419	216.htm	Dichlofluanid	CN(C)S(=O)(=O)N(SC(F)(Cl)Cl)c1ccccc1	890	toksiline	toksiline
426	223.htm	Dicofol	OC(c1ccc(Cl)cc1)(c1ccc(Cl)cc1)C(Cl)(Cl)Cl	43.1	toksiline	mittetoksiline
427	988.htm	Didecyldimethylammonium chloride	CCCCCCCCC[N+](C)(C)CCCCCCCCC	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
428	227.htm	Dienochlor	ClC1=C(Cl)C(Cl)(C2(Cl)C(Cl)=C(Cl)C(Cl)=C2Cl)C(Cl)=C1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
431	233.htm	Difethialone	O=c1c(C2CC(c3ccc(-c4ccc(Br)cc4)cc3)Cc3ccccc32)c(O)sc2ccccc12	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
432	333.htm	Diflovidazin	Fe1ccc(F)c1-c1nnc(-c2ccccc2Cl)nn1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
435	1179.htm	Diiflufenzopyr	CC(=NNC(=O)Nc1cc(F)cc(F)c1)c1nccccc1C(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
436	897.htm	Diketo-metribuzin	CC(C)(C)c1nnc(O)n(N)c1=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
437	237.htm	Dimefuron	CN(C)C(=O)Nc1ccc(-n2nc(C(C)(C)C)oc2=O)c(Cl)c1	300	toksiline	toksiline
438	239.htm	Dimethachlor	COCCN(C(=O)CCl)c1c(C)ccccc1C	70	toksiline	toksiline
439	241.htm	Dimethenamid-P	COCC(C)N(C(=O)CCl)c1c(C)ccsc1C	294.4	toksiline	toksiline
440	242.htm	Dimethipin	CC1=C(C)S(=O)(=O)CCS1(=O)=O	102	toksiline	toksiline
443	2989.htm	Dimethyl phthalate	COC(=O)c1ccccc1C(=O)OC	> 3160	mittetoksiline	toksiline
444	246.htm	Dimoxystrobin	CNC(=O)C(=NOC)c1ccccc1COc1cc(C)ccc1C	23.65	toksiline	toksiline

445	3236.htm	Dinocap 4	C/C=C/C(=O)Oc1c([N+](=O)[O-])cc(CCCCC(C)C)cc1[N+](=O)[O-]	60	toksiline	toksiline
446	3237.htm	Dinocap 6	C/C=C/C(=O)Oc1c(CCCCC(C)C)cc([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]	60	toksiline	toksiline
447	1195.htm	Dinotefuran	CN=C(NCC1CCOC1)N[N+](=O)[O-]	4.9	toksiline	toksiline
448	2567.htm	Diofenolan	CCCI1OCC(COe2ccc(Oc3cccc3)cc2)O1	204	toksiline	toksiline
449	1541.htm	Diquat	c1cc[n+](c1)-c1cccc[n+]1CC2	94.3	toksiline	toksiline
450	257.htm	Disulfoton	CCOP(=S)(OCC)SCCSCC	180	toksiline	toksiline
451	258.htm	Dithianon	N#Cc1sc2c(=O)c3cccc3c(=O)c=2sc1C#N	578	toksiline	mittetoksiline
456	3253.htm	DNOC potassium	Cc1cc([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c1[O-]	16	toksiline	toksiline
458	263.htm	Dodine	CCCCCCCCCCCCN=C(N)N	547	toksiline	toksiline
460	266.htm	Endrin	ClC1=C(Cl)C2(Cl)C3C4CC(C5OC45)C3C1(Cl)C2(Cl)Cl	> 66	toksiline	toksiline
462	268.htm	EPTC	CCCN(CCC)C(=O)SCC	267	toksiline	toksiline
463	269.htm	Esfenvalerate	CC(C)C(C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2cccc2)c1)c1ccc(Cl)cc1	10.6	toksiline	toksiline
465	271.htm	Ethalfuralin	C=C(C)CN(CC)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
468	278.htm	Ethofumesate	CCOC1Oe2ccc(OS(C)(=O)=O)cc2C1(C)C	134	toksiline	toksiline
469	279.htm	Ethoprophos	CCCSPP(=O)(OCC)SCCC	39.6	toksiline	toksiline
470	281.htm	Ethoxysulfuron	CCOc1cccc1OS(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(OC)cc(OC)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
472	1337.htm	Ethylenediamine tetraacetic acid	O=C(O)CN(CCN(CC(=O)O)CC(=O)O)CC(=O)O	156	toksiline	mittetoksiline
473	283.htm	Etofenprox	CCOc1ccc(C(C)(C)COCc2cccc(Oc3cccc3)c2)cc1	> 24.6	toksiline	toksiline
474	284.htm	Etoxazole	CCOc1cc(C(C)(C)C)ccc1C1COC(c2c(F)cccc2F)=N1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
475	1056.htm	Etridiazole acid	CCOC1=NC(=NS1)C(O)=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
476	287.htm	Famoxadone	CC1(c2ccc(Oc3cccc3)cc2)OC(=O)N(Nc2cccc2)C1=O	235	toksiline	toksiline
477	289.htm	Fenamidone	CSC1=NC(C)(c2cccc2)C(=O)N1Nc1cccc1	> 25	toksiline	toksiline
479	791.htm	Fenamiphos sulfone	CCOP(=O)(NC(C)C)Oc1ccc(S(C)(=O)=O)c(C)c1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
480	790.htm	Fenamiphos sulfoxide	CCOP(=O)(NC(C)C)Oc1ccc(S(C)=O)c(C)c1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
481	291.htm	Fenarimol	OC(c1ccc(Cl)cc1)(c1cnenc1)c1cccc1Cl	> 250	toksiline	mittetoksiline
482	292.htm	Fenazaquin	CC(C)(C)c1ccc(CCOc2nenc3cccc23)cc1	> 13.25	toksiline	toksiline
483	293.htm	Fenbuconazole	N#CC(CCC1ccc(Cl)cc1)(Cn1cnnc1)c1cccc1	> 100	toksiline	toksiline
484	296.htm	Fenclorim	Clc1cc(Cl)nc(-c2cccc2)n1	62.5	toksiline	toksiline
486	299.htm	Fenitrothion	COP(=S)(OC)Oc1ccc([N+](=O)[O-])c(C)c1	231	toksiline	toksiline
487	1183.htm	Fenobucarb	CCC(C)c1cccc1OC(=O)NC	10.7	toksiline	toksiline
488	1213.htm	Fenoxanil	CC(OC1ccc(Cl)cc1Cl)C(=O)NC(C)(C#N)C(C)C	71	toksiline	toksiline
489	1004.htm	Fenoxaprop-P	CC(OC1ccc(Oc2nc3ccc(Cl)cc3o2)cc1)C(=O)O	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
492	305.htm	Fenpiclonil	N#Cc1c[nH]cc1-c1cccc(Cl)c1Cl	100	toksiline	toksiline
494	306.htm	Fenpropathrin	CC1(C)C(C(=O)OC(C#N)c2cccc(Oc3cccc3)c2)C1(C)C	184	toksiline	toksiline
498	309.htm	Fenpyroximate	Cc1nn(C)c(Oc2cccc2)c1C=NOCc1ccc(C(=O)OC(C)(C)C)cc1	34.7	toksiline	toksiline
499	310.htm	Fenthion	COP(=S)(OC)Oc1ccc(SC)c(C)c1	375	toksiline	toksiline
500	1174.htm	Fentrazamide	CCN(C(=O)n1nnn(-c2cccc2)c1)=O)C1CCCC1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
505	318.htm	Flamprop-M-isopropyl	CC(C)OC(=O)C(C)N(C(=O)c1cccc1)c1ccc(F)c(Cl)c1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
506	319.htm	Flazasulfuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2nccc2C(F)(F)F)n1	> 15.75	toksiline	mittetoksiline
507	321.htm	Flonicamid	N#CCNC(=O)c1cnccc1C(F)(F)F	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
508	322.htm	Florasulam	COc1ncc(F)c2nc(S(=O)(=O)Nc3c(F)cccc3F)nn12	> 1320	mittetoksiline	mittetoksiline
511	687.htm	Fluacrypyrim	COC=C(C(=O)OC)c1cccc1COc1cc(C(F)(F)F)nc(OC(C)C)n1	23	toksiline	toksiline
514	326.htm	Fluazolate	CC(C)OC(=O)c1cc(-c2nn(C)c(C(F)(F)F)c2Br)c(F)cc1Cl	> 1170	mittetoksiline	mittetoksiline
517	328.htm	Flucycloxuron	O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1F)Nc1ccc(CON=C(c2ccc(Cl)cc2)C2CC2)cc1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
519	2780.htm	Fluetenil	O=C(Cc1ccc(-c2cccc2)cc1)OCCF	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
523	2792.htm	Flufenprox	CCOc1ccc(C(COCc2cccc(Oc3ccc(Cl)cc3)c2)C(F)(F)F)cc1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
524	3249.htm	Fluidinapyr	CC1CC(C)C)c2c(F)ccc(N=C(O)c3cn(C)nc3C(F)F)c21	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
529	1362.htm	Fluopyram	O=C(NCCc1ncc(C(F)(F)F)cc1Cl)c1cccc1C(F)(F)F	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
533	2620.htm	Flupyradifurone	O=C1C=C(N(Cc2ccc(Cl)nc2)CC(F)F)CO1	185.6	toksiline	toksiline
537	345.htm	Fluridone	Cn1cc(-c2cccc2)c(=O)c(-c2cccc(C(F)(F)F)c2)c1	102.6	toksiline	toksiline
539	347.htm	Fluroxypyr	Nc1c(Cl)c(F)nc(OCC(=O)O)c1Cl	> 64.8	toksiline	toksiline
541	348.htm	Flurprimidol	CC(C)C(O)(c1ccc(OC(F)(F)F)cc1)c1cnenc1	164	toksiline	toksiline
542	349.htm	Flurtamone	CNC1=C(c2cccc(C(F)(F)F)c2)C(=O)C(c2cccc2)O1	> 1800	mittetoksiline	mittetoksiline
544	351.htm	Flusulfamide	O=[N+](O-)]c1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c2)c(Cl)c1	9	toksiline	mittetoksiline
545	1499.htm	Fluthiacet methyl	COC(=O)CSc1cc(Nc2sc(=O)n3n2CCCC3)c(F)cc1Cl	948	toksiline	toksiline
550	815.htm	FOE oxalate	CC(C)N(C(=O)C(=O)O)c1ccc(F)cc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
551	814.htm	FOE sulphonic acid	CC(C)N(C(=O)CS(=O)(=O)O)c1ccc(F)cc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
553	355.htm	Fomesafen	CS(=O)(=O)NC(=O)c1cc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
554	356.htm	Fonofos	CCOP(=S)(CC)Sc1cccc1	218	toksiline	toksiline
555	357.htm	Foramsulfuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2cc(NC=O)ccc2C(=O)N(C)C)n1	453	toksiline	mittetoksiline
557	2933.htm	Formetanate hydrochloride	CNC(=O)Oc1cccc(N=CN(C)C)c1	1048	mittetoksiline	mittetoksiline
558	361.htm	Formothion	COP(=S)(OC)SCC(=O)N(C)C=O	157.7	toksiline	toksiline
559	364.htm	Fosthiazate	CCOP(=O)(SC(C)CC)N1CCSC1=O	209	toksiline	toksiline
561	366.htm	Furalaxyl	COC(=O)C(C)N(C(=O)c1cccc1)c1c(C)cccc1C	510	toksiline	toksiline
563	367.htm	Furathiocarb	CCCCOC(=O)N(C)SN(C)C(=O)Oc1cccc2c1OC(C)C)C2	100	toksiline	toksiline
565	371.htm	Gibberellic acid	C=C1CC2CC1(O)CCC2C12C=CC(O)C(C)(C(=O)O1)C2C3C(=O)O	> 1250	mittetoksiline	mittetoksiline

566	1671.htm	Gibberellins	C=C1CC23CC1CCC2C12CCC(O)C1C(C)(C(=O)O1)C2C3C(=O)O	> 1250	mittetoksiline	mittetoksiline
567	372.htm	Glufosinate-ammonium	CP(O)(=O)CCC(N)C(O)=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
568	373.htm	Glyphosate	O=C(O)CNC(P(=O)(O)O)	> 5600	mittetoksiline	mittetoksiline
569	3107.htm	Guadipyr	CCCCC=NN(Cc1ccc(Cl)nc1)C(N)=N[N+](=O)[O-]	100	toksiline	toksiline
570	374.htm	Guazatine	NC(N)=NCCCCCCCCNCCCCCCCN=C(N)N	3420	mittetoksiline	mittetoksiline
573	375.htm	Halfenprox	CC(C)(COCc1cccc(Oc2cccc2)c1)c1ccc(OC(F)(F)Br)cc1	218	toksiline	toksiline
576	1117.htm	Halosulfuron-methyl	COC(=O)c1c(Cl)nn(C)c1S(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(OC)cc(OC)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
578	377.htm	Haloxypop-P	CC(Oc1ccc(Oc2ncc(C(F)(F)F)cc2Cl)cc1)C(=O)O	415	toksiline	toksiline
580	846.htm	Heptachlor epoxide	ClC1=C(C)C2(C)C3C4OC4C(Cl)C3C1(Cl)C2(Cl)Cl	10	toksiline	toksiline
582	382.htm	Hexaconazole	CCCCC(O)(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1Cl	414	toksiline	toksiline
584	383.htm	Hexaflumuron	O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1F)Nc1cc(Cl)c(OC(F)(F)C(F)F)c(Cl)c1	880	toksiline	toksiline
585	385.htm	Hexythiazox	CC1C(c2ccc(Cl)cc2)SC(=O)N1C(=O)NC1CCCCC1	> 52.5	toksiline	toksiline
587	390.htm	Imazalil	C=CCOC(Cn1ccnc1)c1ccc(Cl)cc1Cl	271	toksiline	toksiline
588	1542.htm	Imazamethabenz	Cc1ccc(C(=O)O)c(C2=NC(C)(C(C)C)C(=O)N2)c1	> 123	toksiline	mittetoksiline
589	391.htm	Imazamethabenz-methyl	COC(=O)c1ccc(C)cc1C1=NC(=O)C(C)(C(C)C)N1	> 123	toksiline	toksiline
591	393.htm	Imazapyr	CC(C)C1(C)N=C(c2ncccc2C(=O)O)NC1=O	133	toksiline	mittetoksiline
592	394.htm	Imazaquin	CC(C)C1(C)N=C(c2nc3cccc3cc2C(=O)O)NC1=O	> 23.5	toksiline	mittetoksiline
595	1026.htm	Imibenconazole	Clc1ccc(CSC(Cn2cncn2)=Nc2ccc(Cl)cc2Cl)cc1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
596	397.htm	Imidacloprid	O=[N+](([O-])NC1=NCCN1Cc1ccc(Cl)nc1	10.7	toksiline	toksiline
597	1663.htm	Indaziflam	Cc1ccc2c(c1)C(Nc1nc(N)nc(C(C)F)n1)C(C)C2	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
599	1554.htm	Iodosulfuron	COc1nc(C)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2cc(I)ccc2C(=O)O)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
601	402.htm	Ioxynil	N#Cc1cc(I)c(O)c(I)c1	> 60	toksiline	toksiline
602	1063.htm	Ioxynil octanoate	CCCCCCCC(=O)Oc1c(I)cc(C#N)cc1I	> 60	toksiline	toksiline
603	1140.htm	Ipcnazole	CC(C)C1CCC(Cc2ccc(Cl)cc2)C1(O)Cn1cncn1	298.8	toksiline	mittetoksiline
605	404.htm	Iprovalicarb	Cc1ccc(C(C)NC(=O)C(NC(=O)OC(C)C)C(C)C)cc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
606	405.htm	Isazofos	CCOP(=S)(OCC)Oc1nc(Cl)m(C(C)C)n1	> 0.714	toksiline	toksiline
611	1184.htm	Isoproc carb	CNC(=O)Oc1cccc1C(C)C	> 2.82	toksiline	toksiline
612	2149.htm	Isopropyl 4,5-diethoxy-2-nitrocarbanilate	CCOc1cc(NC(=O)OC(C)C)c([N+](=O)[O-])cc1OCC	28.8	toksiline	mittetoksiline
613	408.htm	Isoprothiolane	CC(C)OC(=O)C(C(=O)OC(C)C)=C1SCCS1	> 91.95	toksiline	toksiline
614	409.htm	Isoproturon	CC(C)c1ccc(NC(=O)N(C)C)cc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
617	412.htm	Isoxaflutole	CS(=O)(=O)c1cc(C(F)(F)F)ccc1C(=O)c1cnc1C1CC1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
618	2440.htm	Jasmonic acid	CCC=CCC1C(=O)CCC1CC(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
619	2195.htm	Kasugamycin	CC1OC(OC2C(O)C(O)C(O)C(O)C2O)C(N)CC1N=C(N)C(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
621	417.htm	Lenacil	O=c1[nH]c2c(c(=O)n1C1CCCCC1)CCC2	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
626	421.htm	Malathion	CCOC(=O)CC(SP(=S)(OC)OC)C(=O)OCC	306	toksiline	toksiline
628	2628.htm	Mandestrobin	CNC(=O)C(OC)c1cccc1COc1cc(C)ccc1C	84	toksiline	toksiline
630	427.htm	MCPA	Cc1cc(Cl)ccc1OCC(=O)O	325	toksiline	toksiline
631	1124.htm	MCPA-thioethyl	CCSC(=O)COc1ccc(Cl)cc1C	140.5	toksiline	toksiline
632	428.htm	MCPB	Cc1cc(Cl)ccc1OCCCC(=O)O	> 263	toksiline	toksiline
634	432.htm	Mefenacet	CN(C(=O)COc1nc2cccc2s1)c1cccc1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
637	752.htm	Melamine	Nc1nc(N)nc(N)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
639	1539.htm	Mepiquat	C[N+](I)C(C)CCCC1	> 3195	mittetoksiline	mittetoksiline
642	442.htm	Mesotrione	CS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)C2C(=O)CCCC2=O)c([N+](=O)[O-])c1	> 2000	mittetoksiline	mittetoksiline
644	444.htm	Metalaxyl	COCC(=O)N(c1c(C)cccc1C)C(C)C(=O)OC	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
645	446.htm	Metaldehyde	CC1OC(C)OC(C)OC(C)O1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
646	1498.htm	Metamifop	CC(Oc1ccc(Oc2nc3ccc(Cl)cc3o2)cc1)C(=O)N(C)c1cccc1F	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
647	448.htm	Metamitron	Cc1nnc(-c2cccc2)c(=O)n1N	914	toksiline	toksiline
648	450.htm	Metazachlor	Cc1cccc(C)c1N(Cn1cccn1)C(=O)CC1	500	toksiline	toksiline
652	453.htm	Methamidophos	COP(N)(=O)SC	34	toksiline	toksiline
653	456.htm	Methidathion	COc1nn(CSP(=S)(OC)OC)c(=O)s1	5.6	toksiline	toksiline
654	457.htm	Methiocarb	CNC(=O)Oc1cc(C)c(SC)c(C)c1	1322	mittetoksiline	mittetoksiline
655	891.htm	Methiocarb sulfoxide	CNC(=O)Oc1cc(C)c(S(C)=O)c(C)c1	78	toksiline	toksiline
656	1649.htm	Methiozolin	Cc1ccsc1C1=NOC(C)(COCc2c(F)cccc2F)C1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
657	458.htm	Methomyl	CNC(=O)ON=C(C)SC	19	toksiline	toksiline
659	856.htm	methyl (1Z)-5-chloro-2-hydroxy-1- [(((methoxycarbonyl)[4-(trifluoromethoxy) phenyl]amino)carbonyl)amino]imino]-2,3-dihydro- 1H-indene-2-carboxylate	COC(=O)N(C(O)=N/N=C1/c2ccc(Cl)cc2CC1(O)C(=O)OC)c1ccc(OC(F)(F)F)cc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
660	2801.htm	Methyl 2-((4-hydroxy-6-methoxypyrimidin-2-yl)amino)- 6-(trifluoromethyl)nicotinate	COC(=O)c1ccc(C(F)(F)F)nc1Nc1nc(O)cc(OC)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
661	1007.htm	Methyl 2-(dimethylamino)-N- (((methylamino)carbonyl)oxy)-2-oxoethanimidothioate	CSC(=NO)C(=O)N(C)C	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
663	943.htm	Methyl N-(2-(1-(4-chlorophenyl)-1H-pyrazol-3- yl)oxymethyl)phenyl)carbamate	COC(=O)Nc1cccc1COc1ccn(-c2ccc(Cl)cc2)n1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
665	855.htm	Methyl-7-chloro-2,5-dihydro-2- (((trifluoromethoxy)phenyl)amino)carbonyl(indeno(1,3,4)oxadiazine- 4a(3H)-carboxylate	COC(=O)[C@@]12Cc3cc(Cl)ccc3C1=NN(C(=O)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1)CO2	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline

670	1211.htm	Metominostrobin	CNC(=O)C(=NOC)c1cccc1Oc1cccc1	> 114	toksiline	toksiline
671	466.htm	Metosulam	COc1cc(OC)n2nc(S(=O)(=O)Nc3c(Cl)ccc(C)c3Cl)nc2n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
672	467.htm	Metoxuron	COc1ccc(NC(=O)N(C)C)cc1Cl	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
675	1555.htm	Metsulfuron	COc1nc(C)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2C(=O)O)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
676	470.htm	Metsulfuron-methyl	COC(=O)c1cccc1S(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(C)nc(OC)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
678	1111.htm	Monocrotophos	CNC(=O)/C=C()/OP(=O)(OC)OC	35	toksiline	toksiline
679	475.htm	Monolinuron	CON(C)C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
680	478.htm	Myclobutanil	CCCCC(C#N)(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1	125	toksiline	toksiline
681	2123.htm	Myristyl acetate	CCCCCCCCCCCCCCCCOC(C)=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
682	2124.htm	Myristyl alcohol	CCCCCCCCCCCCCCCO	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
683	1483.htm	N-(((aminoininomethyl)amino)carbonyl)-1-methyl-4-(2-methyl-2H-tetrazol-5-yl)-1H-pyrazole-5-sulphonamide	Cn1nnc(-c2cnn(C)c2S(=O)(=O)NC(=O)NC=NN)n1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
687	985.htm	N-((N-carbamoylcarbamimidoyl)carbamoyl)-2-chlorobenzenesulfonamide	N=C(NC(N)=O)NC(=O)NS(=O)(=O)c1cccc1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
689	1076.htm	N-(2,6-dichloro-3-methylphenyl)-5-hydroxy-7-methoxy-[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidine-2-sulfonamide	COc1cc(=O)nc2nc(S(=O)(=O)Nc3c(Cl)ccc(C)c3Cl)[nH]n12	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
690	1489.htm	N-(2,6-difluorobenzoyl)-4-tert-butyl-2-ethoxybenzamine	CCOC1cc(C(C)(C)C)ccc1N=C(O)c1c(F)cccc1F	> 9.8	toksiline	toksiline
691	810.htm	N-(2,6-difluorophenyl)-5-aminosulfonyl-1H-1,2,4-triazole-3-carboxylic acid	NS(=O)(=O)c1nc(C(=O)O)nn1-c1c(F)cccc1F	> 0.1	toksiline	mittetoksiline
692	809.htm	N-(2,6-difluorophenyl)-8-fluoro-5-hydroxy(1,2,4)triazolo(1,5-c)pyrimidine-2-sulfonamide	O=S(=O)(Nc1c(F)cccc1F)c1nc2c(F)enc(O)n2n1	> 1120	mittetoksiline	mittetoksiline
693	1044.htm	N-(2,6-dimethylphenyl)-N-(2-methoxyethyl)oxalamic acid	COCCN(C(=O)C(=O)O)c1c(C)cccc1C	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
694	1417.htm	N-(2-chlorothiazol-5-ylmethyl)-N-nitroguanidine	N=C(NCc1cnc(Cl)s1)N[N+](=O)[O-]	970	toksiline	toksiline
696	1426.htm	N-(3-(1-ethyl-1-methyl-2-oxypyrrol)isoxazol-5-yl)-2,6-dimethoxybenzamide	CCC(C)(C1cc(NC(=O)c2c(OC)cccc2OC)on1)C(C)O	520	toksiline	mittetoksiline
699	2145.htm	N-(3-amino-4-ethyl-4-methyl-2-hexenoyl)-2,6-dimethoxybenzamide	CCC(C)(CC)C(N)=CC(=O)NC(=O)c1c(OC)cccc1OC	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
701	1606.htm	N-(4-(2-chloro-4-(trifluoromethyl)phenoxy)-2-fluorophenyl) urea	NC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)cc1F	500	toksiline	toksiline
703	823.htm	N-(4,6-dimethoxypyrimidine-2-yl)-N-(3-methoxycarbonyl-6-trifluoromethylpyridine-2-yl)-amine	COC(=O)c1ccc(C(F)(F)F)nc1Nc1nc(OC)cc(OC)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
705	808.htm	N-(4-trifluoromethyl-nicotinoyl)glycinamide	NCC(=O)NC(=O)c1cnccc1C(F)(F)F	> 100	toksiline	toksiline
708	1008.htm	N,N-dimethyloxamic acid	CN(C)C(=O)C(O)=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
709	1081.htm	N,N-bis-desmethyl triazine amine	CN(C)C1nc(OCC(F)(F)F)nc(N(C)C)n1	865	toksiline	toksiline
710	1240.htm	N,N-dimethyl-2-sulfamoylpyridine-3-carboxamide	CN(C)C(=O)c1ccccc1S(N)(=O)=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
712	912.htm	N-[(4-chlorophenyl)methyl]-N-cyclopentylformamide	Clc1ccc(CNC2CCCC2)cc1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
713	1057.htm	N-[2-Chloro-4-(trifluoromethyl)phenyl]valine	CC(C)[C@H](Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1Cl)C(=O)O	85	toksiline	toksiline
715	2479.htm	N-{6-chloro-7-hydroxy-5-methoxy-[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin-2-yl}-2-methoxy-4-(trifluoromethyl)pyridine-3-sulfonamide	COc1nc2nc(=NS(=O)(=O)c3c(C(F)(F)F)ccnc3OC)[nH]n2c(O)c1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
717	1312.htm	Naphthalene	c1ccc2ccccc2c1	> 2730	mittetoksiline	mittetoksiline
718	2666.htm	Napropamide-M	CCN(CC)C(=O)C(C)Oc1cccc2ccccc12	122.02	toksiline	toksiline
719	744.htm	N-cyclopropylmethoxy-2,3-difluoro-6-trifluoromethylbenzamidine	N=C(NOCC1CC1)c1c(C(F)(F)F)ccc(F)c1F	> 139.5	toksiline	toksiline
720	1448.htm	N-demethylated spinosyn D	CC[C@H]1CCC[C@H](O[C@H]2CC[C@H](N)[C@@H](C)O2)[C@@H](C)(C(=O)C2=C[C@H]3[C@@H]4[C@H]4[C@H](O[C@@H]3)O[C@@H]5O[C@@H](C)[C@H](OC)[C@@H](OC)[C@H]5OC)C[C@H]4C(C)=C[C@H]3[C@@H]2CC(=O)O1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
725	484.htm	Nicosulfuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2ncccc2C(=O)N(C)C)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
726	1612.htm	Nitenpyram	CCN(Cc1ccc(Cl)nc1)C(=C[N+](=O)[O-])NC	32.2	toksiline	toksiline
727	1422.htm	Nitrofen	O=[N+](([O-])c1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)cc1	> 38.0	toksiline	toksiline
728	1064.htm	Nitrothal isopropyl	CC(C)OC(=O)c1cc(C(=O)OC(C)C)cc([N+](=O)[O-])c1	1200	mittetoksiline	mittetoksiline
729	1410.htm	N-malonyl-N-2,6-xylyl-DL-alanine	Cc1cccc(C)c1N(C(=O)CC(=O)O)C(C)C(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
730	3045.htm	N-methyl bentazone	CC(C)N1C(=O)c2ccccc2N(C)S1(=O)=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
732	1407.htm	N-methyl(6-chloro-3-pyridyl)methylamine	CNCc1ccc(Cl)nc1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
734	2560.htm	Normicotine	c1cnccc(C2CCCN2)c1	> 10	toksiline	toksiline
735	487.htm	Novaluron	O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1F)Nc1ccc(OC(F)(F)C(F)OC(F)(F)F)c(Cl)c1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
736	1355.htm	Noviflumuron	O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1F)Nc1cc(Cl)c(OC(F)(F)C(F)(F)F)c(Cl)c1F	> 10000	mittetoksiline	mittetoksiline
737	2607.htm	N-tert-butyl-N'-(4,5-dimethyl-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-6-carbonyl)-3,5-dimethylbenzohydrazide	Cc1cc(C)cc(C(=O)N(N=C(O)c2ccc3c(c2C)(C)CCO3)C(C)(C)C)c1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
739	981.htm	O-(2,6-dichloro-4-methylphenyl) O-methyl O-hydrogen phosphorothioate	COP(O)(=S)Oc1c(Cl)cc(C)cc1Cl	100	toksiline	toksiline
740	3141.htm	O,P'-DDT	Clc1ccc(C(c2ccccc2Cl)C(Cl)(Cl)Cl)cc1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
741	936.htm	O-desmethyl triasulfuron	Cc1nc(O)nc(N=C(O)NS(=O)(=O)c2ccccc2OCC)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
742	492.htm	Omethoate	CNC(=O)CSP(=O)(OC)OC	46	toksiline	toksiline

743	1135.htm	Orthosulfamuron	<chem>COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)Nc2ccccc2C(=O)N(C)C)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
746	495.htm	Oxadiargyl	<chem>C#CCOCc1cc(-n2nc(C(C)(C)C)oc2=O)c(Cl)cc1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
748	497.htm	Oxadixyl	<chem>COCC(=O)N(c1c(C)cccc1C)N1CCOC1=O</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
750	499.htm	Oxasulfuron	<chem>Cc1cc(C)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2C(=O)OC2COC2)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
751	2618.htm	Oxathiapirolin	<chem>Cc1cc(C(F)(F)F)nn1CC(=O)N1CCC(c2nc(C3=NOC(c4c(F)cccc4F)C3)cs2)/CC1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
753	501.htm	Oxydemeton-methyl	<chem>CCS(=O)CCSP(=O)(OC)OC</chem>	115	toksiline	toksiline
754	502.htm	Oxyfluorfen	<chem>CCOCc1cc(OC2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
756	3105.htm	Paichongding	<chem>CCCOC1CC(C)C([N+](=O)[O-])=C2N(Cc3ccc(Cl)nc3)CCN21</chem>	> 238.5	toksiline	mittetoksiline
757	2018.htm	Para-cymene	<chem>Cc1ccc(C(C)C)cc1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
759	506.htm	Parathion-ethyl	<chem>CCOP(=S)(OCC)Oc1ccc([N+](=O)[O-])cc1</chem>	> 267	toksiline	toksiline
760	507.htm	Parathion-methyl	<chem>COP(=S)(OC)Oc1ccc([N+](=O)[O-])cc1</chem>	40	toksiline	toksiline
762	510.htm	Pencycuron	<chem>O=C(Nc1ccccc1)N(Cc1ccc(Cl)cc1)C1CCCC1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
764	1655.htm	Penflufen	<chem>Cc1nn(C)c(F)c1C(=O)Nc1ccccc1C(C)CC(C)C</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
765	512.htm	Penoxsulam	<chem>COc1cnc(OC)n2nc(NS(=O)(=O)c3c(OCC(F)F)cccc3C(F)(F)F)nc12</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
766	949.htm	Pentachloroaniline	<chem>Nc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl</chem>	100	toksiline	toksiline
767	513.htm	Pentachlorophenol	<chem>Oc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl</chem>	48	toksiline	toksiline
770	515.htm	Permethrin	<chem>CC1(C)C(C=C(C)C)C1C1C(=O)OCc1ccccc1Oc2ccccc2)c1</chem>	1440	mittetoksiline	mittetoksiline
771	1011.htm	Pethoxamid	<chem>CCOCCN(C(=O)C)C1C(=C(C)C)c1ccccc1</chem>	316	toksiline	toksiline
772	516.htm	Phenmedipham	<chem>COC(=O)Nc1ccccc1OC(=O)Nc2ccccc2C)c1</chem>	36	toksiline	toksiline
773	519.htm	Phorate	<chem>CCOP(=S)(OCC)SCSCC</chem>	20.8	toksiline	toksiline
774	520.htm	Phosalone	<chem>CCOP(=S)(OCC)SCN1c(=O)oc2cc(Cl)ccc21</chem>	22.5	toksiline	toksiline
775	521.htm	Phosmet	<chem>COP(=S)(OC)SCN1C(=O)c2ccccc2C1=O</chem>	52	toksiline	toksiline
776	524.htm	Phoxim	<chem>CCOP(=S)(OCC)ON=C(C#N)c1ccccc1</chem>	> 40.4	toksiline	toksiline
777	1212.htm	Phthalide	<chem>O=C1OCc2ccccc21</chem>	2000	mittetoksiline	mittetoksiline
778	525.htm	Picloram	<chem>Nc1c(Cl)c(Cl)nc(C(=O)O)c1Cl</chem>	> 4475	mittetoksiline	mittetoksiline
782	1176.htm	Piperophos	<chem>CCCOCP(=S)(OCCC)SCC(=O)N1CCCCC1C</chem>	180	toksiline	toksiline
784	534.htm	Pretilachlor	<chem>CCCOCCN(C(=O)C)C1c1c(CC)cccc1CC</chem>	19.23	toksiline	toksiline
785	535.htm	Primisulfuron	<chem>O=C(Nc1nc(OC(F)F)cc(OC(F)F)n1)NS(=O)(=O)c1ccccc1C(=O)O</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
786	1622.htm	Primisulfuron methyl	<chem>COC(=O)c1ccccc1S(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(OC(F)F)cc(OC(F)F)n1</chem>	100	toksiline	mittetoksiline
788	537.htm	Procymidone	<chem>CC12CC1(C)C(=O)N(c1cc(Cl)cc(Cl)c1)C2=O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
789	1202.htm	Prodiamine	<chem>CCCN(CCC)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)c(N)c1[N+](=O)[O-]</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
790	1028.htm	Profoxydim	<chem>CCCC(NOCC(C)Oc1ccc(Cl)cc1)=C1C(=O)CC(C2CCSC2)CC1=O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
791	1719.htm	Prohexadione	<chem>CCC(=O)C1C(=O)CC(C(=O)O)CC1=O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
792	539.htm	Prohexadione-calcium	<chem>CCC(=O)[C-]1C(=O)CC(C(=O)O)CC1=O</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
793	540.htm	Promecarb	<chem>CNC(=O)Oc1cc(C)cc(C(C)C)c1</chem>	> 8.81	toksiline	toksiline
794	542.htm	Prometryn	<chem>CSc1nc(NC(C)C)nc(NC(C)C)n1</chem>	153	toksiline	toksiline
795	543.htm	Propachlor	<chem>CC(C)N(C(=O)CC)c1ccccc1</chem>	218	toksiline	toksiline
799	547.htm	Propargite	<chem>C#CCOS(=O)OC1CCCCC1Oc1ccc(C(C)(C)C)cc1</chem>	378	toksiline	toksiline
800	551.htm	Propiconazole	<chem>CCCC1COC(Cn2cncn2)(c2ccc(Cl)cc2Cl)O1</chem>	686	toksiline	toksiline
805	929.htm	Propylene urea	<chem>OC1=NCCCN1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
806	556.htm	Propyzamide	<chem>C#CC(C)(C)NC(=O)c1cc(Cl)cc(Cl)c1</chem>	> 173	toksiline	toksiline
808	557.htm	Prosulfocarb	<chem>CCCN(CCC)C(=O)SCc1ccccc1</chem>	71.8	toksiline	toksiline
809	558.htm	Prosulfuron	<chem>COc1nc(C)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2CCC(F)(F)F)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
810	559.htm	Prothioconazole	<chem>OC(Cc1ccccc1Cl)(Cn1[nH]cnc1=S)C1(Cl)CC1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
811	3086.htm	Pydiflumetofen	<chem>CON(C(=O)c1en(C)nc1C(F)F)C(C)Cc1c(Cl)cc(Cl)cc1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
812	562.htm	Pymetrozine	<chem>CC1=NNC(=O)N(N=Cc2ccnc2)C1</chem>	1098	mittetoksiline	mittetoksiline
813	564.htm	Pyraclostrobin	<chem>COC(=O)N(OC)c1ccccc1COc1cnc(-c2ccc(Cl)cc2)n1</chem>	567	toksiline	toksiline
814	1558.htm	Pyraflufen	<chem>Cn1nc(-c2cc(OC(=O)O)c(Cl)cc2F)c(Cl)c1OC(F)F</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
816	1236.htm	Pyrasulfotole	<chem>Cc1[nH]n(C)c(=O)c1C(=O)c1ccc(C(F)(F)F)cc1S(C)(=O)=O</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
819	2533.htm	Pyrethrins	<chem>C=CC=CCC1=C(C)C(OC(=O)C2C(C=C(C)C)(=O)OC)C2(C)C)CC1=O</chem>	23.7	toksiline	toksiline
820	568.htm	Pyrethrins	<chem>C=CC=CCC1=C(C)C(OC(=O)C2C(C=C(C)C)C2(C)C)CC1=O</chem>	23.7	toksiline	toksiline
821	2534.htm	Pyrethrins	<chem>CC=CCC1=C(C)C(OC(=O)C2C(C=C(C)C)(=O)OC)C2(C)C)CC1=O</chem>	23.7	toksiline	toksiline
824	2532.htm	Pyrethrins	<chem>CCC=CCC1=C(C)C(OC(=O)C2C(C=C(C)C)C2(C)C)CC1=O</chem>	23.7	toksiline	toksiline
825	569.htm	Pyridaben	<chem>CC(C)(C)c1ccc(CSc2nnn(C(C)(C)C)c(=O)c2Cl)cc1</chem>	19	toksiline	toksiline
826	570.htm	Pyridafenthion	<chem>CCOP(=S)(OCC)Oc1ccc(=O)n(-c2ccccc2)n1</chem>	> 2.87	toksiline	toksiline
829	571.htm	Pyridate	<chem>CCCCCCCCSC(=O)Oc1cc(Cl)nn1-c1ccccc1</chem>	799	toksiline	toksiline
830	2481.htm	Pyridine sulfonamide	<chem>NS(=O)(=O)c1cccn1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
831	572.htm	Pyrifenoxy	<chem>CON=C(Cc1ccnc1)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	733	toksiline	toksiline
832	573.htm	Pyrimethanil	<chem>Cc1cc(C)nc(Nc2ccccc2)n1</chem>	313	toksiline	toksiline
837	1133.htm	Pyroxsulam	<chem>COc1cc(OC)n2nc(NS(=O)(=O)c3c(C(F)(F)F)ccnc3OC)nc2n1</chem>	> 10000	mittetoksiline	mittetoksiline
838	576.htm	Quinalphos	<chem>CCOP(=S)(OCC)Oc1cnc2ccccc2n1</chem>	118.4	toksiline	toksiline
839	578.htm	Quinmerac	<chem>Cc1cnc2c(C(=O)O)c(Cl)ccc2c1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
840	579.htm	Quinoclamine	<chem>NC1=C(Cl)C(=O)c2ccccc2C1=O</chem>	> 125	toksiline	toksiline
841	924.htm	quinoxaline-2,3-diol	<chem>O=c1[nH]c2ccccc2[nH]c1=O</chem>	500	toksiline	toksiline
846	586.htm	Rimsulfuron	<chem>CCS(=O)(=O)c1ccccc1S(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(OC)cc(OC)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
847	1244.htm	Saflufenacil	<chem>CC(C)N(C)S(=O)(=O)NC(=O)c1cc(-n2c(=O)cc(C(F)(F)F)n(C)c2=O)c(F)cc1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline

0	992.htm	(1R,2E,3S,4R,5R)-2-((4-chlorophenyl)methylidene)-4,5-dimethyl-1-[(1H-1,2,4-triazol-1-yl)methyl]cyclopentane-1,3-diol	C[C@H]1[C@H](O)/C(=C2ccc(Cl)cc2)[C@@](O)(Cn2cncn2)[C@@H]1C	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
2	942.htm	(1Z)-bis[2-({[1-(4-chlorophenyl)-1H-pyrazol-3-yl]oxy)methyl]phenyl]diazene-1-ium-1-olate	[O-][N+](=Nc1ccccc1COc1ccn(-c2ccc(Cl)cc2)n1)c1ccccc1COc1ccn(-c2ccc(Cl)cc2)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
17	2899.htm	(R)-2-((2,6-Dimethyl-phenyl)-(2-methoxy-acetyl)-amino)-propionic acid	COCC(=O)N(c1c(C)cccc1C)[C@H](C)C(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
21	789.htm	(S)-5-methyl-2-methylthio-5-phenyl-3,5-dihydroimidazol-4-one	CSC1=N[C@@](C)(C)(c2ccccc2)C(=O)N1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
23	1604.htm	(S)-cyano(3-phenoxyphenyl)methyl (1R,3S)-3-[(1Z)-3-[(1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-yl)oxy]-3-oxoprop-1-en-1-yl]-2,2-dimethylcyclopropane-1-carboxylate	CC1(C)[C@@H]/C=C(=O)OC(C(F)(F)F)C(F)(F)F)[C@H]1C(=O)O[C@H](C#N)c1cccc(Oc2ccccc2)c1	> 1535	mittetoksiline	toksiline
28	1220.htm	{3-chloro-4-[1,1,2-trifluoro-2-(trifluoromethoxy)ethoxy]phenyl}urea	N=C(O)Nc1ccc(OC(F)(F)C(F)OC(F)(F)F)c(Cl)c1	1000	mittetoksiline	toksiline
34	2911.htm	1-(4-(4-(5-(2,6-Difluorophenyl)-4,5-dihydro-3-isoxazolyl)-2-thiazolyl)-4-hydroxy-1-piperidiny)-2-(5-methyl-3-(trifluoromethyl)-1H-pyrazol-1-yl)ethanone	Cc1cc(C(F)(F)F)nn1CC(=O)N1CCC(O)(c2nc(C3=NOC(c4c(F)cccc4F)C3)cs2)CC1	> 100.0	toksiline	mittetoksiline
47	1330.htm	1-naphthylacetic acid	O=C(O)Cc1ccccc2ccccc12	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
49	1238.htm	2-(((4-hydroxy-6-methoxypyrimidin-2-yl)carbamoyl)sulfamoyl)-N,N-dimethylpyridine-3-carboxamide	COc1cc(O)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2ncccc2C(=O)N(C)C)n1	> 1250	mittetoksiline	mittetoksiline
55	1035.htm	2-((aminosulfonyl)methyl)benzoic acid	NS(=O)(=O)Cc1ccccc1C(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
77	1585.htm	2,3-difluoro-6-(trifluoromethyl)benzamide	NC(=O)c1c(C(F)(F)F)ccc(F)c1F	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
80	963.htm	2,4,5-trichlorophenol	Oc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	46	toksiline	toksiline
85	1050.htm	2,4-dichlorobenzoic acid	O=C(O)c1ccc(Cl)cc1Cl	562	toksiline	toksiline
89	2496.htm	2,6-dichloro-4-methyl-1H-pyrido[2,1-b]quinazolin-11-one	Cc1cc(Cl)cc2c(=O)n3cccc(Cl)c3nc12	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
101	1491.htm	2-amino-2-(4-tert-butyl-2-ethoxyphenyl)ethan-1-ol	CCOc1cc(C(C)(C)C)ccc1C(N)CO	> 9.9	toksiline	toksiline
103	945.htm	2-amino-4,6-dimethylpyrimidine	Cc1cc(C)nc(N)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
116	1433.htm	2-ethylsulfonyl ethane sulfonic acid	CCS(=O)(=O)CCS(=O)(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
117	785.htm	2-hydroxy-2-(4-phenoxyphenyl)propanoic acid	CC(O)(C(=O)O)c1ccc(Oc2ccccc2)cc1	> 250	toksiline	mittetoksiline
119	868.htm	2-mesyl-4-trifloromethylbenzoic acid	CS(=O)(=O)c1cc(C(F)(F)F)ccc1C(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
123	1331.htm	2-naphthylxyacetic acid	O=C(O)COc1ccc2ccccc2c1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
130	702.htm	3-(2,2-dichlorovinyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylic acid	CC1(C)C(C=C(Cl)Cl)C1C(=O)O	51.5	toksiline	toksiline
136	720.htm	3-(2-chloro-5-(4-(difluoromethyl)-3-methyl-5-oxo-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-4-fluorophenyl)propanoic acid	Cc1nn(-c2cc(CCC(=O)O)c(Cl)cc2F)c(=O)n1C(F)F	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
141	1251.htm	3-(4-hydroxy-6-methoxypyrimidin-2-yl)-1-(N-methyl-N-methylsulfonyl-aminosulfonyl)-urea	COc1cc(O)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)N(C)S(C)(=O)=O)n1	> 52	toksiline	mittetoksiline
151	997.htm	3,5-dichloro-N-(1-ethyl-1-methyl-2-oxopropyl)-4-methylbenzamide	CCC(C)(NC(=O)c1cc(Cl)c(C)cc1)C(C)=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
156	818.htm	3-chloro-5-trifluoromethyl-pyridine-2-carboxylic acid	O=C(O)c1ncc(C(F)(F)F)cc1Cl	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
163	2214.htm	3-hydroxy-5-(oxan-4-yl)-2-propanimidoylcyclohex-2-en-1-one	CCC(=N)C1=C(O)CC(C2CCOCC2)CC1=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
168	692.htm	3-phenoxybenzoic acid	O=C(O)c1cccc(Oc2ccccc2)c1	74	toksiline	toksiline
174	2693.htm	4-(((3-bromo-1-(3-chloropyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl)carbonyl)amino)-N3,5-dimethylisophthalamide	CNC(=O)c1cc(C(N)=O)cc(C)c1NC(=O)c1cc(Br)nn1-c1ncccc1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
182	806.htm	4,6-dimethoxy-N-(3-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl)pyrimidin-2-amine	COc1cc(OC)nc(Nc2ncccc2C(F)(F)F)n1	> 1250	mittetoksiline	toksiline
197	3082.htm	4-carbamoyl-2,5-dichloro-6-cyanobenzene-1,3-disulfonic acid	N#Cc1c(Cl)c(C(N)=O)c(S(=O)(=O)O)c(Cl)c1S(=O)(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
201	738.htm	4-chloro-5-p-tolylimidazole-2-carbonitrile	Cc1ccc(-c2nc(C#N)[nH]c2Cl)cc1	56	toksiline	toksiline
211	893.htm	4-methanesulfonyl-3,5-dimethylphenol	Cc1cc(O)cc(C)c1S(C)(=O)=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
214	807.htm	4-trifluoromethylnicotinic acid	O=C(O)c1cnccc1C(F)(F)F	> 100	toksiline	mittetoksiline
221	921.htm	5,6-dimethyl-2-(methylamino)pyrimidin-4-ol	Cc1cccc(C)c1O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
224	1105.htm	5-amino-4-chloro-2-methyl-3(2H)-pyridazinone	Cn1ccc(N)c(Cl)c1=O	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
229	917.htm	6-(3-trifluoromethylphenoxy)-2-pyridine carboxylic acid	O=C(O)c1cccc(Oc2ccccc2C(F)(F)F)c2n1	477	toksiline	toksiline
230	3053.htm	6-(trifluoromethyl)pyridin-2(1H)-one	O=c1cccc(C(F)(F)F)[nH]1	320	toksiline	toksiline
240	919.htm	8-(2,6-diethyl-4-methylphenyl)-8-hydroxy-hexahydro-1H-pyrazolo[1,2-d][1,4,5]oxadiazepine-7,9-dione	CCc1cc(C)cc(CC)c1C1O(C)=O)N2CCOCCN2C1=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
242	1354.htm	8-hydroxyquinoline	Oc1cccc2ccccc12	> 204.3	toksiline	toksiline
262	27.htm	Ametryn	CCNc1nc(NC(C)C)nc(SC)n1	166	toksiline	toksiline
265	29.htm	Aminopyralid	Nc1cc(Cl)nc(C(=O)O)c1Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
271	1551.htm	Asulam	COC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
275	51.htm	Azinphos-methyl	COP(=S)(OC)SCn1nnc2ccccc2c1=O	59	toksiline	toksiline

277	54.htm	Azoxystrobin	COC=C(C(=O)OC)c1cccc1Oc1cc(Oc2ccccc2C#N)ncn1	283	toksiline	toksiline
281	1086.htm	Benazolin ethyl	CCOC(=O)Cn1c(=O)se2cccc(Cl)c21	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
283	61.htm	Bendiocarb	CNC(=O)Oc1cccc2c1OC(C)(C)O2	188	toksiline	toksiline
293	71.htm	Bentazone	CC(C)N1C(=O)c2ccccc2NS1(=O)=O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
299	2547.htm	Benzonitrile carboxylic acid	N#Cc1ccc(C(=O)O)cc1	> 1000	mittetoksiline	toksiline
300	2621.htm	Benzovindiflupyr	Cn1cc(C(=O)Nc2cccc3c2C2CCC3C2=C(Cl)Cl)c(C(F)F)n1	203.15	toksiline	mittetoksiline
313	90.htm	Bromethalin	CN(c1c(Br)cc(Br)cc1Br)c1c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])cc1C(F)(F)F	> 100	toksiline	mittetoksiline
320	746.htm	Bromoxynil octanoate	CCCCCCCC(=O)Oc1c(Br)cc(C#N)cc1Br	45	toksiline	toksiline
325	1163.htm	Butafenacil	C=CCOC(=O)C(C)(C)OC(=O)c1cc(-n2c(=O)cc(C(F)(F)F)n(C)c2=O)ccc1Cl	1250	mittetoksiline	mittetoksiline
327	1087.htm	Butoxydim	CCCC(=O)c1c(C)cc(C)c(C2CC(=O)C(C(C)C)=NOCC)=C(O)C2)c1C	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
328	106.htm	Cadusafos	CCOP(=O)(SC(C)CC)SC(C)CC	7.2	toksiline	toksiline
334	118.htm	Carbofuran	CNC(=O)Oc1cccc2c1OC(C)(C)C2	224	toksiline	toksiline
338	1019.htm	Carpropamid	CCC1(C(=O)NC(C)c2ccc(Cl)cc2)C(C)C1(Cl)Cl	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
343	135.htm	Chlorethoxyfos	CCOP(=S)(OCC)OC(Cl)C(Cl)(Cl)Cl	0.39	toksiline	toksiline
345	139.htm	Chlorfluazuron	O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1F)Nc1cc(Cl)c(Oc2ncc(C(F)(F)F)cc2Cl)c(Cl)c1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
351	1005.htm	Chlorobenzoxazalone	O=c1[nH]c2c(Cl)cccc2o1	560	toksiline	toksiline
357	155.htm	Chlorpyrifos-methyl	COP(=S)(OC)Oc1nc(Cl)c(Cl)cc1Cl	182	toksiline	toksiline
360	1476.htm	Chlorthion	COP(=S)(OC)Oc1ccc([N+](=O)[O-])c(Cl)c1	500	toksiline	toksiline
379	171.htm	Clothianidin	CN=C(NCc1cnc(Cl)s1)N[N+](=O)[O-]	13.21	toksiline	toksiline
391	747.htm	Cyhalofop	CC(Oc1ccc(Oc2ccc(C#N)cc2F)cc1)C(=O)O	> 1000	mittetoksiline	toksiline
394	196.htm	Cymoxanil	CCNC(=O)NC(=O)C(C#N)=NOC	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
395	197.htm	Cypermethrin	CC1(C)C(C(=C(Cl)Cl)C1C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2ccccc2)c1	> 100	toksiline	mittetoksiline
396	198.htm	Cyproconazole	CC1(C)C1C(O)(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1	168	toksiline	toksiline
401	754.htm	DDE	ClC(Cl)=C(c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(Cl)cc1	61	toksiline	toksiline
410	207.htm	Desmedipham	CCOC(=O)Nc1cccc(OC(=O)Nc2ccccc2)c1	> 79	toksiline	toksiline
412	865.htm	Desmethylisoproturon	CN=C(O)Nc1ccc(C(C)C)cc1	180	toksiline	toksiline
417	213.htm	Dicamba	COc1c(Cl)ccc(Cl)c1Cl(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
425	1154.htm	Diclosulam	CCOc1nc(F)cc2nc(S(=O)(=O)Nc3c(Cl)cccc3Cl)nn12	991	toksiline	mittetoksiline
441	244.htm	Dimethoate	CNC(=O)CSP(=S)(OC)OC	31	toksiline	toksiline
452	259.htm	Dithiopyr	CSC(=O)c1c(C(F)F)nc(C(F)(F)F)c(C(=O)SC)c1CC(C)C	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
454	418.htm	D-limonene	C=C(C)C1CC=C(C)CC1	999.7	toksiline	mittetoksiline
455	261.htm	DNOC	Cc1cc([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c1O	16	toksiline	toksiline
459	264.htm	Endosulfan	O=S1OCC2C(CO1)C1(Cl)C(Cl)=C(Cl)C2(Cl)C1(Cl)Cl	> 14	toksiline	toksiline
464	270.htm	Ethaboxam	CCNc1nc(CC)c(C(=O)NC(C#N)c2cccs2)s1	1000	mittetoksiline	toksiline
466	1146.htm	Ethametsulfuron-methyl	CCOc1nc(NC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2C(=O)OC)n1	153.72	toksiline	mittetoksiline
467	275.htm	Ethiofencarb	CCSCc1ccccc1OC(=O)NC	120	toksiline	toksiline
478	290.htm	Fenamiphos	CCOP(=O)(NC(C)C)Oc1ccc(SC)c(C)c1	888	toksiline	toksiline
520	2895.htm	Fluensulfone	O=S(=O)(CCC(F)=C(F)F)c1ncc(Cl)s1	153	toksiline	toksiline
521	331.htm	Flufenacet	CC(C)N(C(=O)COc1nnc(C(F)(F)F)s1)c1ccc(F)cc1	219	toksiline	toksiline
530	339.htm	Fluoroglycofen	O=C(O)COC(=O)c1cc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	6	toksiline	mittetoksiline
536	344.htm	Flurenol	O=C(O)C1(O)c2ccccc2-c2ccccc21	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
538	346.htm	Flurochloridone	O=C1C(Cl)C(CCl)CN1c1cccc(C(F)(F)F)c1	> 227	toksiline	toksiline
543	350.htm	Flusilazole	C[Si](Cn1cncn1)(c1ccc(F)cc1)c1ccc(F)cc1	388	toksiline	toksiline
549	2002.htm	Fluxapyroxad	Cn1cc(C(=O)Nc2ccccc2-c2cc(F)c(F)c(F)c2)c(C(F)F)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
562	2908.htm	Furalaxyl-M	COC(=O)C(C)N(C(=O)c1ccc(C(=O)c2ccccc2)cc1)c1c(C)cccc1C	510	toksiline	toksiline
571	2630.htm	Halaluxifen	COc1c(Cl)ccc(-c2cc(N)c(Cl)c(C(=O)O)n2)c1F	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
574	1058.htm	Haloaniline	Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1Cl	106	toksiline	toksiline
581	379.htm	Heptenophos	COP(=O)(OC)OC1=C(Cl)C2C=CCC12	> 98	toksiline	toksiline
583	1336.htm	Hexadecanoic acid	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
593	395.htm	Imazethapyr	CCc1cnc(C2=NC(C)(C)C(C)C(=O)N2)c(C(=O)O)c1	10000	mittetoksiline	mittetoksiline
594	396.htm	Imazosulfuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2c(Cl)nc3ccccc23)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
635	3143.htm	Mefenpyr diethyl	CCOC(=O)C1=NN(c2ccc(Cl)cc2Cl)C(C)(C(=O)OCC)C1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
640	883.htm	Mesosulfuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2cc(CNS(C)(=O)=O)ccc2C(=O)O)n1	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
649	890.htm	Metazachlor sulfonic acid	Cc1cccc(C)c1N(CN1CC=CC=N1)C(=O)CS(=O)(=O)O	933.5	toksiline	mittetoksiline
651	452.htm	Methabenzthiazuron	CNC(=O)N(C)c1nc2ccccc2s1	840	toksiline	toksiline
667	464.htm	Metobromuron	CON(C)C(=O)Nc1ccc(Br)cc1	233	toksiline	toksiline
669	1723.htm	Metolcarb	CNC(=O)Oc1cccc(C)c1	> 7.17	toksiline	toksiline
674	469.htm	Metribuzin	CSc1nnc(C(C)(C)C)c(=O)n1N	427	toksiline	toksiline
677	473.htm	Molinate	CCSC(=O)N1CCCCC1	289	toksiline	toksiline
697	866.htm	N-(3-(1-hydroxy-1-methyl-propyl)-5-isoxazoly)-2,6-dimethoxybenzamide	CCC(C)(O)c1cc(NC(=O)c2c(OC)cccc2OC)on1	48.1	toksiline	mittetoksiline
731	984.htm	N-methyl triazine amine	CNc1ccnnn1	> 10	toksiline	toksiline
733	486.htm	Norflurazon	CNc1cnn(-c2cccc(C(F)(F)F)c2=O)c1Cl	1000	mittetoksiline	toksiline
738	488.htm	Nuarimol	OC(c1ccc(F)cc1)(c1cncn1)c1ccccc1Cl	100000	mittetoksiline	mittetoksiline
744	1142.htm	Orysastrobin	CNC(=O)C(=NOC)c1ccccc1CON=C(C)C(=NOC)C(C)=NOC	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
749	498.htm	Oxamyl	CNC(=O)ON=C(SC)C(=O)N(C)C	112	toksiline	toksiline

752	1879.htm	Oxolinic acid	<chem>CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc3c(cc21)OCO3</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
758	505.htm	Paraquat	<chem>C[n+]1ccc(-c2cc[n+](C)cc2)cc1</chem>	> 1000	mittetoksiline	toksiline
763	511.htm	Pendimethalin	<chem>CCC(CC)Nc1c([N+])(=O)[O-])cc(C)c1[N+](=O)[O-]</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
780	527.htm	Picoxystrobin	<chem>COC=C(C(=O)OC)c1ccccc1COc1ccc(C(F)(F)F)n1</chem>	3.4	toksiline	toksiline
783	530.htm	Pirimicarb	<chem>Cc1nc(N(C)C)nc(OC(=O)N(C)C)c1C</chem>	653	toksiline	toksiline
797	545.htm	Propanil	<chem>CCC(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	734	toksiline	toksiline
802	1380.htm	Propisochlor	<chem>CCc1cccc(C)c1N(COC(C)C)C(=O)CCl</chem>	248	toksiline	toksiline
807	555.htm	Proquinazid	<chem>CCCOc1nc2ccc(l)cc2c(=O)n1CCCC</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
817	566.htm	Pyrazophos	<chem>CCOC(=O)c1cn2nc(OP(=S)(OCC)OCC)cc2nc1C</chem>	1000	mittetoksiline	mittetoksiline
822	2531.htm	Pyrethrins	<chem>CC=CCC1=C(C)C(OC(=O)C2C(C=C(C)C)C2(C)C)CC1=O</chem>	23.7	toksiline	toksiline
823	2535.htm	Pyrethrins	<chem>CCC=CCC1=C(C)C(OC(=O)C2C(C=C(C)C(=O)OC)C2(C)C)CC1=O</chem>	23.7	toksiline	toksiline
833	1581.htm	Pyriminobac-methyl	<chem>CON=C(C)C1cccc(Oc2nc(OC)cc(OC)n2)c1C(=O)OC</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
834	2460.htm	Pyriofenone	<chem>COc1cc(C)c(C(=O)c2c(OC)nc(Cl)c2C)c(OC)c1OC</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
843	1093.htm	Quizalofop	<chem>CC(Oc1ccc(Oc2nc3cc(Cl)ccc3n2)cc1C(=O)O</chem>	474	toksiline	mittetoksiline
851	591.htm	Silthiofam	<chem>C=CCNC(=O)c1c([Si](C)(C)C)sc(C)c1C</chem>	133	toksiline	mittetoksiline
855	1027.htm	S-metolachlor	<chem>CCc1cccc(C)c1N(C(=O)CCl)(C)COC</chem>	570	toksiline	toksiline
859	1096.htm	Sodium 5-nitroguaiacolate	<chem>COc1ccc([N+](=O)[O-])cc1[O-]</chem>	> 11.8	toksiline	mittetoksiline
865	597.htm	Spirodiclofen	<chem>CCC(C)(C)C(=O)OC1=C(Cc2ccc(Cl)cc2Cl)C(=O)OC12CCCCC2</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
869	600.htm	Sulcotrione	<chem>CS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)C2C(=O)CCCC2=O)c(Cl)c1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
878	612.htm	Tebufenpyrad	<chem>CCc1nn(C)c(C(=O)NCc2ccc(C(C)(C)C)cc2)c1Cl</chem>	20.5	toksiline	mittetoksiline
887	620.htm	Terbacil	<chem>Cc1[nH]c(=O)n(C(C)C)C)c(=O)c1Cl</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
889	623.htm	Terbutylazine	<chem>CCNc1nc(Cl)nc(NC(C)(C)C)n1</chem>	> 141.7	toksiline	toksiline
892	626.htm	Tetraconazole	<chem>FC(F)C(F)(F)OCC(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	71	toksiline	toksiline
896	630.htm	Thiacloprid	<chem>N#CN=C1SCCN1Cc1ccc(Cl)nc1</chem>	105	toksiline	toksiline
906	1065.htm	Thiocyclam	<chem>CN(C)C1CSSSC1</chem>	87	toksiline	toksiline
910	971.htm	Thiophene sulfonamide	<chem>NS(=O)(=O)c1cccs1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
918	648.htm	Triadimefon	<chem>CC(C)(C)C(=O)C(OC(Oc1ccc(Cl)cc1)n1cncn1</chem>	> 50	toksiline	toksiline
922	652.htm	Triazamate	<chem>CCOC(=O)CSc1nc(C(C)(C)C)nn1C(=O)N(C)C</chem>	340	toksiline	toksiline
941	674.htm	Tritosulfuron	<chem>COc1nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2C(F)(F)F)nc(C(F)(F)F)n1</chem>	> 1000	mittetoksiline	mittetoksiline
948	681.htm	Warfarin	<chem>CC(=O)CC(c1ccccc1)c1c(O)c2ccccc2oc1=O</chem>	> 10	toksiline	mittetoksiline

Tabel S3. Väljajäetud andmekomplekt

Nr	ID	Nimi	SMILES	LD ₅₀ $\left[\frac{mg}{kg} \right]$	Enn.
1	778.htm	(1RS)-2-amino-2-oxo-1-(3-phenoxyphenyl)ethyl	<chem>CC(C)C(C(=O)OC(C(=O)N)O)c1ccccc1Oc2ccccc2c1)c1ccc(Cl)cc1</chem>	> 969	mittetoksiline
4	1053.htm	(2,5-dichloro-4-(1,1,2,3,3,3-hexafluoro-propoxy)-phenyl)-urea	<chem>NC(=O)Nc1cc(Cl)c(OC(F)(F)C(F)(F)F)cc1Cl</chem>	> 305	toksiline
5	821.htm	(2E)-2-(2-[6-(2-chlorophenoxy)-5-fluoropyrimidin-4-yl]oxyphenyl)-2-(methoxyimino)acetic acid	<chem>CO/N=C(/C(=O)O)c1ccccc1Oc1ncnc(Oc2ccccc2Cl)c1F</chem>	> 500	mittetoksiline
7	3052.htm	(2E)-3-methoxy-2-2-(((6-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl)oxy)methyl)phenyl)acrylic acid	<chem>CO/C=C(/C(=O)O)c1ccccc1COc1ccc(C(F)(F)F)n1</chem>	> 500	mittetoksiline
8	1263.htm	(2RS)-1-(4-chlorophenyl)-4,4-dimethyl-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)pentan-3-one	<chem>CC(C)(C)C(=O)C(Cc1ccc(Cl)cc1)n1cncn1</chem>	> 500	toksiline
30	851.htm	1-(2,4-dichlorophenyl)2-imidazol-1-ylethanol	<chem>O=C(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	> 500	toksiline
37	1041.htm	1-(6-fluoro-2-benzothiazol-2-yl)ethanol	<chem>CC(O)c1nc2ccc(F)cc2s1</chem>	> 498	mittetoksiline
42	1732.htm	1-decanol	<chem>CCCCCCCCCO</chem>	> 627.6	mittetoksiline
51	2897.htm	2-((2-((1RS)-1-methoxy-2-(methylamino)-2-oxoethyl)benzyl)oxy)-4-methylbenzoic acid	<chem>CNC(=O)C(OC)c1ccccc1COc1cc(Cl)ccc1C(=O)O</chem>	> 500	mittetoksiline
63	1038.htm	2-(2,4-dichlorophenyl)-3-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-1-ol	<chem>OCC(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	> 500	toksiline
79	729.htm	2,4,5-trichloro-6-hydroxybenzene-1,3-dicarbonitrile	<chem>N#Cc1c(O)c(Cl)c(Cl)c(C#N)c1Cl</chem>	> 585	mittetoksiline
90	817.htm	2,6-dichlorobenzamide	<chem>NC(=O)c1c(Cl)cccc1Cl</chem>	> 750	toksiline
95	2609.htm	2-[2-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzenesulfinyl]-2-[(2Z)-3-(2-methoxyphenyl)-1,3-thiazolidin-2-ylidene]acetoneitrile	<chem>COc1ccccc1N1CCS/C1=C(C/C#N)S(=O)c1cc(C(F)(F)F)ccc1F</chem>	> 500	mittetoksiline
98	2610.htm	2-[2-fluoro-5-(trifluoromethyl)phenyl]sulfanyl-2-[(2Z)-3-(2-methoxyphenyl)-1-oxo-1-lambda ⁴ , 3-thiazolidin-2-ylidene]acetoneitrile	<chem>COc1ccccc1N1CCS(=O)/C1=C(C/C#N)Sc1cc(C(F)(F)F)ccc1F</chem>	> 500	mittetoksiline
111	2177.htm	2-chloro-5-(4-chloro-5-difluoromethoxy-1-methylpyrazol-3-yl)-4-fluorophenol	<chem>Cn1nc(-c2cc(O)c(Cl)cc2F)c(Cl)c1OC(F)F</chem>	> 500	mittetoksiline
118	737.htm	2-hydroxy-3-fluoro-5-chloro-pyridine	<chem>Oc1ccc(Cl)cc1F</chem>	> 408	mittetoksiline
124	2184.htm	2-oxyfenazaquin	<chem>CC(C)(C(=O)O)c1ccc(CCOc2nnc3ccccc23)cc1</chem>	> 500	mittetoksiline
128	2898.htm	3-((2-((1RS)-1-methoxy-2-(methylamino)-2-oxoethyl)benzyl)oxy)-4-methylbenzoic acid	<chem>CNC(=O)C(OC)c1ccccc1COc1cc(C(=O)O)ccc1C</chem>	> 500	mittetoksiline
154	2476.htm	3-bromo-6-fluoro-2-methyl-1-(1H-1,2,4-triazole-3-yl)sulfonylindole	<chem>Cc1c(Br)c2ccc(F)cc2n1S(=O)(=O)c1nc[nH]n1</chem>	> 500	mittetoksiline

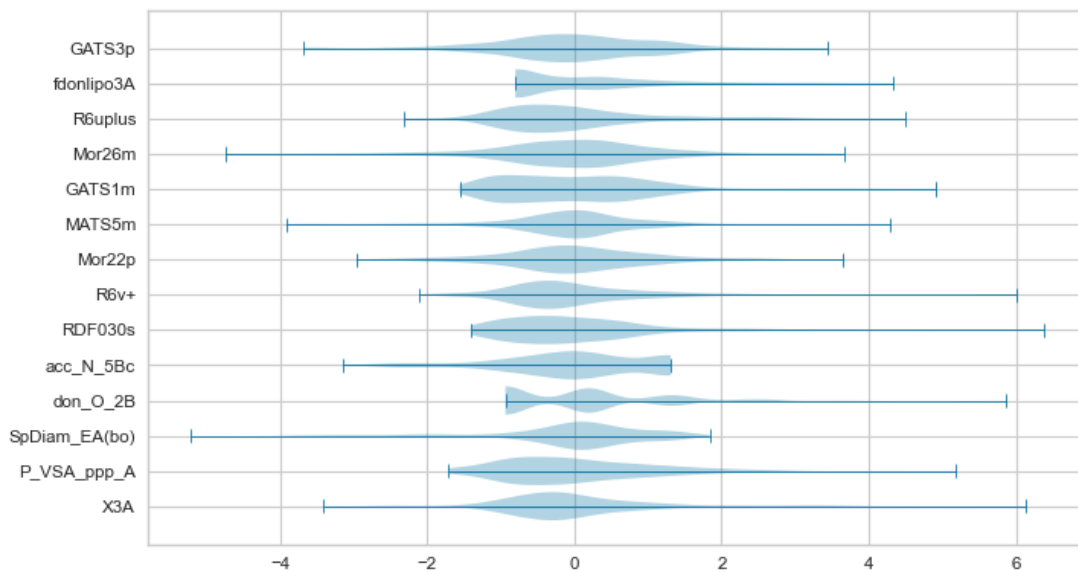
173	2694.htm	4-(((3-bromo-1-(3-chloropyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl)carbonyl)amino)-3-methyl-5-(methylcarbamoyl)benzoic acid	CNC(=O)c1ccc(C(=O)O)cc(C)c1NC(=O)c1cc(Br)nn1-c1ncccc1Cl	> 938	mittetoksiline
177	2380.htm	4-(7-amino-5-ethyl(1,2,4) triazolo(1,5-a)pyrimidin-6-yl) butanoic acid	CCc1nc2ncnn2c(N)c1CCCC(=O)O	> 817	mittetoksiline
179	3059.htm	4-(allylcarbamoyl)-3-methyl-5-(trimethylsilyl)thiophene-2-carboxylic acid	C=CCNC(=O)c1c([Si](C)(C)C)sc(C(=O)O)c1C	> 465	mittetoksiline
180	1640.htm	4,4-methylenedianiline	Nc1ccc(Cc2ccc(N)cc2)cc1	> 444	toksiline
181	2658.htm	4,5,6,7-tetrahydro-2-benzofuran-1,3-dione	O=C1OC(=O)C2=C1CCCC2	> 480	toksiline
188	2546.htm	4-5-hydroxy-3-oxo-4-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]-6-[3-(trifluoromethyl)phenyl]-2,3,4,5-tetrahydro-1,2,4-triazin-5-ylbenzonitrile	OC1(N(C(=O)NN=C1C1=CC=CC(=C1)C(F)(F)F)C1=CC=C(OC(F)(F)F)C=C1)C1=CC=C(C=C1)C#N	> 500	mittetoksiline
198	3060.htm	4-carbamoyl-3-methyl-5-(trimethylsilyl)thiophene-2-carboxylic acid	Cc1c(C(=O)O)sc([Si](C)(C)C)c1C(N)=O	> 460.5	mittetoksiline
199	2176.htm	4-chloro-3-(4-chloro-2-fluoro-5-methoxyphenyl)-5-difluoromethoxy-1-methylpyrazole	COc1cc(-c2nn(C)c(OC(F)F)c2Cl)c(F)cc1Cl	> 500	mittetoksiline
222	786.htm	5-[4-(4-hydroxyphenoxy)phenyl]-5-methyl-3-(phenylamino)-1,3-oxazolidine-2,4-dione	CC1(c2ccc(OC3ccc(O)cc3)cc2)OC(=O)N(Nc2cccc2)C1=O	> 500	mittetoksiline
232	2686.htm	6-chloro-4-methoxy-3-phenylpyridazine	COc1cc(Cl)nnc1-c1cccc1	> 346.5	toksiline
233	1040.htm	6-fluoro-2-hydroxybenzothiazole	O=c1[nH]c2ccc(F)cc2s1	> 996	toksiline
237	2163.htm	7-chloro-1,2,4-benzotriazin-3-amine 1-oxide	Nc1nc2ccc(Cl)cc2[n+][O-]n1	> 500	mittetoksiline
248	13.htm	Acibenzolar-S-methyl	CSC(=O)c1cccc2nnsc12	> 500	mittetoksiline
284	62.htm	Benfluralin	CCCCN(CC)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	> 500	mittetoksiline
286	64.htm	Benfuresate	CCS(=O)(=O)Oc1ccc2c(c1)C(C)C(CO2	> 734	toksiline
295	2172.htm	Benthiavalicarb isopropyl	CC(C)OC(=O)NC(C(=O)NC(C)c1nc2ccc(F)cc2s1)C(C)C	> 500	mittetoksiline
301	76.htm	Bifenazate	COc1ccc(-c2cccc2)cc1NNC(=O)OC(C)C	> 429	toksiline
302	77.htm	Bifenox	COC(=O)c1cc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	> 500	mittetoksiline
305	83.htm	Bispyribac-sodium	COc1cc(OC)nc(Oc2cccc(OC3nc(OC)cc(OC)n3)c2C(=O)[O-])n1	> 957	mittetoksiline
309	86.htm	Boscalid	O=C(Nc1cccc1-c1ccc(Cl)cc1)c1ccnc1Cl	> 500	toksiline
310	87.htm	Brodifacoum	O=c1oc2cccc2c(O)c1C1CC(c2ccc(-c3ccc(Br)cc3)cc2)Cc2cccc21	> 994	mittetoksiline
311	3091.htm	Broflanilide	CN(C(=O)c1ccccl1)c1ccc(C(=O)Nc2c(Br)cc(C(F)(C(F)F)F)C(F)F)F)cc2C(F)(F)F)c1F	> 500	mittetoksiline
321	97.htm	Bromuconazole	Clc1ccc(C2(Cn3cncn3)CC(Br)CO2)c(Cl)c1	> 500	toksiline
322	99.htm	Bupirimate	CCCCc1c(O)nc(NCC)nc1OS(=O)(=O)N(C)C	> 500	mittetoksiline
323	100.htm	Buprofezin	CC(C)N1C(=O)N(c2cccc2)CSC1=NC(C)(C)C	> 500	mittetoksiline
329	113.htm	Captafol	O=C1C2CC=CCC2C(=O)N1SC(Cl)(Cl)C(Cl)Cl	> 351	mittetoksiline
330	114.htm	Captan	O=C1C2CC=CCC2C(=O)N1SC(Cl)(Cl)Cl	> 519	mittetoksiline
337	123.htm	Carfentrazone-ethyl	CCOC(=O)C(Cl)Cc1cc(-n2nc(C)m(C(F)F)c2=O)c(F)cc1Cl	> 410	mittetoksiline
352	146.htm	Chlorophacinone	O=C1c2cccc2C(=O)C1C(=O)C(c1ccccl1)c1ccc(Cl)cc1	> 300	mittetoksiline
358	156.htm	Chlorsulfuron	COc1nc(C)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2cccc2Cl)n1	> 750	mittetoksiline
359	157.htm	Chlorthal-dimethyl	COC(=O)c1c(Cl)c(Cl)c(C(=O)OC)c(Cl)c1Cl	> 500	mittetoksiline
361	1136.htm	Chromafenozide	Cc1cc(C)cc(C(=O)N(NC(=O)c2ccc3c(c2C)CCCOC3)C(C)(C)C)c1	> 500	mittetoksiline
368	735.htm	Clethodim sulfoxide	CCC(=NOCC=CC)C1=C(O)CC(C(C)S(=O)CC)CC1=O	> 500	mittetoksiline
381	1662.htm	Cyantraniliprole	CNC(=O)c1cc(C#N)cc(C)c1NC(=O)c1cc(Br)nn1-c1ncccc1Cl	> 945	mittetoksiline
382	186.htm	Cyazofamid	Cc1ccc(-c2c(Cl)nc(C#N)n2S(=O)(=O)N(C)C)cc1	> 500	mittetoksiline
383	187.htm	Cyclanilide	O=C(O)C1(C(=O)Nc2ccc(Cl)cc2Cl)CC1	> 469	mittetoksiline
384	2632.htm	Cyclaniliprole	CC(NC(=O)c1cc(Cl)cc(Br)c1NC(=O)c1cc(Br)nn1-c1ncccc1Cl)C1CC1	> 500	mittetoksiline
386	1147.htm	Cyclosulfamuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)Nc2cccc2C(=O)C2CC2)n1	> 892	mittetoksiline
387	189.htm	Cycloxydim	CCCC(=NOCC)C1=C(O)CC(C2CCCSC2)CC1=O	> 500	mittetoksiline
388	191.htm	Cyflufenamid	O=C(Cc1cccc1)NC(=NOCC1CC1)c1c(C(F)(F)F)ccc(F)c1F	> 500	mittetoksiline
403	205.htm	Deltamethrin	CC1(C)C(C=C(Br)Br)C1C(=O)OC(C#N)c1ccc(Oc2cccc2)c1	> 645	mittetoksiline
407	888.htm	Desamino-metamitron	Cc1nnc(-c2cccc2)c(O)n1	> 500	toksiline
420	219.htm	Dichlorprop-P	CC(Oc1ccc(Cl)cc1Cl)C(=O)O	> 500	toksiline
421	764.htm	Diclofop	CC(Oc1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)cc1)C(=O)O	> 500	toksiline
422	221.htm	Diclofop-methyl	COC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)cc1	> 500	toksiline
423	2137.htm	Diclofop-phenol	Oc1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)cc1	> 365	toksiline
424	222.htm	Dicloran	Nc1c(Cl)cc([N+](=O)[O-])cc1Cl	> 885	toksiline
429	228.htm	Diethofencarb	CCOc1ccc(NC(=O)OC(C)C)cc1OCC	> 500	mittetoksiline
430	230.htm	Difenoconazole	CC1COC(Cn2cncn2)(c2ccc(Oc3ccc(Cl)cc3)cc2Cl)O1	> 610	mittetoksiline
433	234.htm	Diflubenzuron	O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1F)Nc1ccc(Cl)cc1	> 500	toksiline
434	235.htm	Diflufenican	O=C(Nc1ccc(F)cc1F)c1ccnc1Oc1cccc(C(F)(F)F)c1	> 500	toksiline
442	245.htm	Dimethomorph	COc1ccc(C(=CC(=O)N2CCOCC2)c2ccc(Cl)cc2)cc1OCC	> 500	mittetoksiline
453	260.htm	Diuron	CN(C)C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	> 798	toksiline
457	1046.htm	Dodemorph acetate	CC1CN(C2CCCCCCCCC2)CC(C)O1	> 824	mittetoksiline
461	267.htm	Epoxiconazole	Fe1ccc(C2(Cn3cncn3)OC2c2cccc2Cl)cc1	> 500	mittetoksiline
485	298.htm	Fenhexamid	CC1(C(=O)Nc2ccc(O)c(Cl)c2Cl)CCCCC1	> 500	mittetoksiline

490	303.htm	Fenoxaprop-P-ethyl	CCOC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2nc3ccc(Cl)cc3o2)cc1	> 500	toksiline
491	304.htm	Fenoxycarb	CCOC(=O)NCCOc1ccc(Oc2ccccc2)cc1	> 425	toksiline
495	307.htm	Fenpropidin	CC(Cc1ccc(C(C)(C)C)cc1)CN1CCCCC1	> 500	mittetoksiline
496	308.htm	Fenpropimorph	CC(Cc1ccc(C(C)(C)C)cc1)CN1CC(C)OC(C)C1	> 500	mittetoksiline
497	2010.htm	Fenpyrazamine	C=CCSC(=O)n1c(N)c(-c2ccccc2C)c(=O)n1C(C)C	> 400	mittetoksiline
501	316.htm	Fipronil	N#Cc1nn(-c2c(Cl)cc(C(F)(F)F)cc2Cl)c(N)c1S(=O)C(F)(F)F	> 500	mittetoksiline
502	801.htm	Fipronil amide	NC(=O)c1nn(-c2c(Cl)cc(C(F)(F)F)cc2Cl)c(N)c1S(=O)C(F)(F)F	> 500	mittetoksiline
503	803.htm	Fipronil sulfide	N#Cc1nn(-c2c(Cl)cc(C(F)(F)F)cc2Cl)c(N)c1SC(F)(F)F	> 500	mittetoksiline
504	802.htm	Fipronil sulfone	N#Cc1nn(-c2c(Cl)cc(C(F)(F)F)cc2Cl)c(N)c1S(=O)(=O)C(F)(F)F	> 500	mittetoksiline
512	324.htm	Fluazifop-P-butyl	CCCCOC(=O)C(C)Oe1ccc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cn2)cc1	> 500	toksiline
513	325.htm	Fluazinam	O=[N+](=[O-])c1cc(C(F)(F)F)c(Cl)c([N+](=O)[O-])c1Nc1ncc(C(F)(F)F)cc1C1	> 500	mittetoksiline
515	1132.htm	Flubendiamide	Cc1cc(C(F)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)ccc1NC(=O)c1cccc1c1C(=O)NC(C)(C)CS(C)(=O)=O	> 500	mittetoksiline
518	330.htm	Fludioxonil	N#Cc1c[nH]cc1-c1cccc2c1OC(F)(F)O2	>= 1000	mittetoksiline
522	332.htm	Flufenoxuron	O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1F)Nc1ccc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)cc1F	> 500	mittetoksiline
525	1197.htm	Flumetralin	CCN(Cc1c(F)cccc1Cl)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	> 500	mittetoksiline
526	335.htm	Flumioxazin	C#CCN1C(=O)COc2cc(F)c(N3C(=O)C4=C(CCCC4)C3=O)cc21	> 491	mittetoksiline
527	336.htm	Fluometuron	CN(C)C(=O)Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	> 500	toksiline
528	337.htm	Fluopicolide	O=C(NCc1ncc(C(F)(F)F)cc1Cl)c1c(Cl)cccc1Cl	> 500	mittetoksiline
531	340.htm	Fluoxastrobin	CON=C(C1=NOCCO1)c1cccc1Oe1nccc(Oc2ccccc2Cl)c1F	> 500	mittetoksiline
532	1550.htm	Flupoxam	NC(=O)c1nc(-c2ccccc2)n(-c2ccc(Cl)c(COCC(F)(F)C(F)F)c2)n1	> 484	mittetoksiline
535	342.htm	Fluquinconazole	O=c1c2cc(F)ccc2nc(-n2cncn2)n1-c1ccc(Cl)cc1Cl	> 500	mittetoksiline
540	1120.htm	Fluroxypyr-meptyl	CCCCCCC(C)OC(=O)COc1nc(F)c(Cl)c(N)c1Cl	> 500	toksiline
546	2608.htm	Flutianil	COc1cccc1N1CCSC1=C(C#N)Sc1cc(C(F)(F)F)ccc1F	> 500	mittetoksiline
547	352.htm	Flutolanil	CC(C)Oe1cccc(NC(=O)c2ccccc2C(F)(F)F)c1	> 500	toksiline
548	353.htm	Flutriafol	OC(Cn1cncn1)(c1ccc(F)cc1)c1cccc1F	> 500	mittetoksiline
552	354.htm	Folpet	O=C1c2ccccc2C(=O)N1SC(Cl)(Cl)Cl	> 500	mittetoksiline
556	358.htm	Forchlorfenuron	O=C(Nc1cccc1)Nc1cnc(Cl)c1	> 500	toksiline
560	365.htm	Fuberidazole	c1coc(-c2nc3cccc3[nH]2)c1	> 500	toksiline
564	369.htm	Gamma-cyhalothrin	CC1(C)C(C=C(Cl)C(F)(F)F)C1C1C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2ccccc2)c1	> 650	toksiline
572	2631.htm	Halauxifen-methyl	COC(=O)c1nc(-c2ccc(Cl)c(OC)c2F)cc(N)c1Cl	> 500	mittetoksiline
575	376.htm	Halofenozide	CC(C)(C)N(NC(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)c1cccc1	> 980	mittetoksiline
577	1067.htm	Haloxypop-etotyl	CCOCCOC(=O)C(C)Oe1ccc(Oc2nccc(C(F)(F)F)cc2Cl)cc1	> 880	toksiline
579	1068.htm	Haloxypop-P-methyl	COC(=O)C(C)Oe1ccc(Oc2nccc(C(F)(F)F)cc2Cl)cc1	> 672	toksiline
586	1094.htm	Hydroxy quizalofop	CC(Oc1ccc(Oc2nc3ccc(Cl)cc3[nH]c2=O)cc1)C(=O)O	> 500	mittetoksiline
590	392.htm	Imazamox	COCc1cnc(C2=NC(C)(C)C(C)=O)N2)c(C(=O)O)c1	> 901	mittetoksiline
598	399.htm	Indoxacarb	COC(=O)N(C(=O)N1COC2(C(=O)OC)Cc3cc(Cl)ccc3C2=N1)c1ccc(OC(F)(F)F)cc1	> 625	mittetoksiline
604	403.htm	Iprodione	CC(C)NC(=O)N1CC(=O)N(c2cc(Cl)cc(Cl)c2)C1=O	> 500	mittetoksiline
607	406.htm	Isofenphos	CCOP(=S)(NC(C)C)Oe1cccc1C(=O)OC(C)C	> 404	toksiline
608	1672.htm	Isofenphos-methyl	COP(=S)(NC(C)C)Oe1cccc1C(=O)OC(C)C	> 404	toksiline
609	2781.htm	Isofetamid	Cc1cc(OC(C)C)ccc1C(=O)C(C)(C)NC(=O)c1secc1C	> 500	mittetoksiline
615	1449.htm	Isopyrazam	CC(C)C1C2CCC1c1c(NC(=O)c3cn(C)nc3C(F)F)cccc12	> 500	mittetoksiline
616	411.htm	Isoxaben	CCC(C)(CC)c1cc(NC(=O)c2c(OC)cccc2OC)on1	> 500	toksiline
620	414.htm	Kresoxim-methyl	CON=C(C(=O)OC)c1cccc1COe1cccc1C	> 469	toksiline
623	419.htm	Linuron	CON(C)C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	> 500	mittetoksiline
624	1234.htm	Lithium perfluorooctane sulfonate	OS(=O)(=O)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	> 316	mittetoksiline
625	420.htm	Lufenuron	O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1F)Nc1cc(Cl)c(OC(F)(F)C(F)(F)F)cc1Cl	> 500	mittetoksiline
627	2379.htm	Maltodextrin	O=CC(O)C(O)C(O)C(O)CO	> 500	mittetoksiline
629	425.htm	Mandipropamid	C#CCOc1ccc(CCNC(=O)C(OC#C)c2ccc(Cl)cc2)cc1OC	> 500	mittetoksiline
633	431.htm	Mecoprop-P	Cc1cc(Cl)ccc1OC(C)C(=O)O	> 988	toksiline
636	434.htm	Mefluidide	CC(=O)Nc1cc(NS(=O)(=O)C(F)(F)F)c(Cl)cc1C	> 500	mittetoksiline
638	435.htm	Mepanipyrim	CC#Cc1cc(C)nc(Nc2ccccc2)n1	> 500	toksiline
643	443.htm	Metaflumizone	N#Cc1ccc(CC(=NNC(=O)Nc2ccc(OC(F)(F)F)cc2)c2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1	> 500	toksiline
650	451.htm	Metconazole	CC1(C)CCC(Cc2ccc(Cl)cc2)C1(O)Cn1cncn1	> 500	mittetoksiline
658	461.htm	Methoxyfenozide	COc1cccc(C(=O)NN(C(=O)c2cc(C)cc(C)c2)C(C)(C)C)c1C	> 607	mittetoksiline
666	1409.htm	Methyl-N-malonyl-N-2,6-xylyl-DL-alaninate	COC(=O)C(C)N(C(=O)CC(=O)O)c1c(C)cccc1C	> 500	mittetoksiline
673	468.htm	Metrafenone	COc1cc(C)c(C(=O)c2c(OC)ccc(Br)c2C)c(OC)c1OC	> 500	mittetoksiline
688	933.htm	N-(1,1-dimethylacetyl)-3,5-dichlorobenzamide	CC(=O)C(C)(C)NC(=O)c1cc(Cl)cc(Cl)c1	> 522	toksiline
698	862.htm	N-(3,5-dichlorophenyl)-3-isopropyl-2,4-dioxoimidazoline-1-carboxamide	CC(C)N=C(O)N1CC(=O)N(c2cc(Cl)cc(Cl)c2)C1=O	> 500	mittetoksiline
700	1262.htm	N-(4-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-yl)-2-methylphenyl)-3-hydroxy-N-(2-methyl-1-(methylsulfonyl)propan-2-yl)phthalamide	Cc1cc(C(F)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)ccc1N(C(=O)c1cccc(O)c1C(N)=O)C(C)(C)CS(C)(=O)=O	> 500	mittetoksiline
707	2502.htm	N-(phenylacetyl)-N-(2,6-xylyl)-D-alanine	Cc1cccc(C)c1N(C(=O)Cc1cccc1)[C@H](C)C(=O)O	> 500	toksiline
711	1079.htm	N,N-dimethyl-6-(2,2,2-trifluoroethoxy)-1,3,5-triazine-2,4-diamine	CN(C)c1nc(N)nc(OC(C)(F)F)n1	> 320.4	toksiline

721	2482.htm	N-demethyl-spinetoram-J	CCO[C@@H]1[C@@H](OC)[C@H](C)O[C@@H](O[C@@H]2C[C@H]3CC[C@H]4[C@@H]5CC(=O)O[C@@H](CC)CCC[C@H](O)[C@H]6CC[C@H](NC)[C@@H](C)O6)[C@@H](C)C(=O)C5=C[C@H]4[C@@H]3C2)[C@@H]1OC	> 500	mittetoksiline
722	2484.htm	N-demethyl-spinetoram-L	CCO[C@@H]1[C@@H](OC)[C@H](C)O[C@@H](O[C@H]2C[C@H]3[C@@H]4C=C5C(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]6CC[C@H](NC)[C@@H](C)O6)CCC[C@H](CC)OC(=O)C[C@H]5[C@@H]4C=C(C)[C@@H]3C2)[C@@H]1OC	> 500	mittetoksiline
723	1080.htm	N-desmethyl triazine amine	CN=c1[nH]c(OCC(F)(F)F)nc(=N)[nH]1	> 500	mittetoksiline
724	1439.htm	N-formyl-N'-propyl-N'-2(2,4,6-trichlorophenoxy)ethylurea	CCCN(CCOc1c(Cl)cc(Cl)cc1Cl)C(=O)NC=O	> 500	toksiline
745	494.htm	Oryzalin	CCCN(CCC)c1c([N+](=O)[O-])cc(S(N)(=O)=O)cc1[N+](=O)[O-]	> 500	mittetoksiline
747	496.htm	Oxadiazon	CC(C)Oc1cc(-n2nc(C(C)(C)C)oc2=O)c(Cl)cc1Cl	> 500	mittetoksiline
755	504.htm	Pacllobutrazol	CC(C)(C)(O)(C)(Cc1ccc(Cl)cc1)n1cnc1	> 500	mittetoksiline
761	509.htm	Penconazole	CCCC(Cn1cnc1)c1ccc(Cl)cc1Cl	> 331.5	toksiline
768	1210.htm	Penthiopyrad	CC(C)CC(C)c1sccec1NC(=O)c1cn(C)nc1C(F)(F)F	> 500	mittetoksiline
769	1162.htm	Pentoxazone	CC(C)=C1OC(=O)N(c2cc(OC3CCCC3)c(Cl)cc2F)C1=O	> 851	mittetoksiline
779	526.htm	Picolinafen	O=C(Nc1ccc(F)cc1)c1cccc(Oc2cccc(C(F)(F)F)c2)n1	> 500	toksiline
781	528.htm	Pinoxaden	CCc1cc(C)cc(Cc1-c1c(OC(=O)C(C)(C)C)n2n(c1=O)CCOCC2	> 500	mittetoksiline
787	536.htm	Prochloraz	CCCN(CCOc1c(Cl)cc(Cl)cc1Cl)C(=O)n1ccnc1	> 500	toksiline
796	544.htm	Propamocarb hydrochloride	CCCO(C(=O)NCCCN(C)C	> 660	mittetoksiline
798	546.htm	Propaquizafop	CC(C)=NOCCOC(=O)C(O)Cc1ccc(Oc2cnc3cc(Cl)ccc3n2)cc1	> 500	mittetoksiline
815	565.htm	Pyraflufen-ethyl	CCOC(=O)COc1cc(-c2nn(C)c(OC(F)F)c2Cl)c(F)cc1Cl	> 500	mittetoksiline
827	944.htm	Pyridafol	O=c1cc(Cl)[nH]nc1-c1ccccc1	> 348	toksiline
828	1139.htm	Pyridalyl	FC(F)(F)c1ccc(OCCCCOe2c(Cl)cc(OCC=C(Cl)Cl)cc2Cl)nc1	> 500	mittetoksiline
835	574.htm	Pyriproxyfen	CC(COc1ccc(Oc2ccccc2)cc1)Oc1ccccc1	> 500	toksiline
836	1367.htm	Pyroxasulfone	Cn1nc(C(F)(F)F)c(CS(=O)=O)c2=NOC(C)(C)C2)c1OC(F)F	> 997	mittetoksiline
842	580.htm	Quinoxifen	Fe1ccc(Oc2cnc3cc(Cl)cc(Cl)c23)cc1	> 923	mittetoksiline
844	583.htm	Quizalofop-P-ethyl	CCOC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2cnc3cc(Cl)ccc3n2)cc1	> 500	toksiline
845	584.htm	Quizalofop-P-tefuryl	CC(Oc1ccc(Oc2cnc3cc(Cl)ccc3n2)cc1)C(=O)OCC1CCCO1	> 500	mittetoksiline
848	1665.htm	Sedaxane	Cn1cc(C(=O)Nc2ccccc2C2CC2C2CC2)c(C(F)F)n1	> 500	mittetoksiline
849	589.htm	Sethoxydim	CCCC(=NOCC)C1=C(O)CC(C(C)SCC)CC1=O	> 542	mittetoksiline
857	1601.htm	2-[(4,6-dimethoxypyrimidin-2-yl)oxy]-6-[(4-hydroxy-6-methoxypyrimidin-2-yl)oxy]benzoate	COc1cc([O-])nc(Oc2ccccc(Oc3nc(OC)cc(OC)n3)c2C(=O)O)n1	> 855	mittetoksiline
858	1600.htm	2-[(4,6-dimethoxypyrimidin-2-yl)oxy]-6-hydroxybenzoate	COc1cc(OC)nc(Oc2ccccc(O)c2C(=O)=O)n1	> 890	mittetoksiline
862	1144.htm	Spinetoram	CCOC1C(OC)C(C)OC(OC2CC3CCC4C5CC(=O)OC(CC)CCCC(OC6CCCC(C)(C)O6)C(C)C(=O)C5=CC4C3C2)C1OC	> 500	mittetoksiline
863	596.htm	Spinosad	CCC1CCCC(OC2CCC(N(C)C)(C)O2)C(C)C(=O)C2CC3C4CC(OC5CC(C)C(OC)C(OC)C5OC)CC4CCC3C2CC(=O)O1	> 458	mittetoksiline
868	599.htm	Spiroxamine	CCCN(CC)CC1COC2(CCC(C(C)(C)C)CC2)O1	> 500	mittetoksiline
872	603.htm	Sulfosulfuron	CCS(=O)(=O)c1nc2ccccc2c1S(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(OC)cc(OC)n1	> 848	mittetoksiline
875	608.htm	Tau-fluvalinate	CC(C)C(Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1Cl)C(=O)OC(C#N)c1ccccc2c1	> 500	toksiline
880	614.htm	Tebuthiuron	CNC(=O)N(C)c1nnc(C(C)(C)C)s1	> 690	toksiline
882	616.htm	Teflubenzuron	O=C(NC(=O)c1c(F)ccccc1F)Nc1cc(Cl)c(F)c(Cl)c1F	> 500	mittetoksiline
912	644.htm	Tolclofos-methyl	COP(=S)(OC)Oc1c(Cl)cc(C)cc1Cl	> 500	toksiline
915	1247.htm	T-oxanilic acid	O=C(O)C(=O)Nc1ccccc1	> 500	mittetoksiline
919	649.htm	Triadimenol	CC(C)(C)C(O)C(Oc1ccc(Cl)cc1)n1cnc1	> 390.5	mittetoksiline
924	654.htm	Triazoxide	[O-][n+]1nc(-n2cnc2)nc2ccc(Cl)cc21	> 500	mittetoksiline
927	659.htm	Triclopyr	O=C(O)COc1nc(Cl)c(Cl)cc1Cl	> 521	toksiline
930	664.htm	Trifloxystrobin	CON=C(C(=O)OC)c1ccccc1CON=C(C)c1ccccc(C(F)(F)F)c1	> 500	toksiline
931	1150.htm	Trifloxysulfuron	COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2nccccc2OCC(F)(F)F)n1	> 748	mittetoksiline
934	666.htm	Triflumuron	O=C(NC(=O)c1ccccc1Cl)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	> 500	toksiline
935	667.htm	Trifluralin	CCCN(CCC)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	> 500	mittetoksiline
940	673.htm	Triticonazole	CC1(C)CCC(=Cc2ccc(Cl)cc2)C1(O)Cn1cnc1	> 500	mittetoksiline
942	1249.htm	T-sulfinylacetic acid	CCOCN(C(=O)CS(=O)CC(=O)O)c1c(C)ccccc1CC	> 500	mittetoksiline
943	1248.htm	T-sulfonic acid	CCOCN(C(=O)CS(=O)(=O)O)c1c(C)ccccc1CC	> 500	mittetoksiline

Tabel S4. Treeningkomplekti deskriptorite keskväärtused ja standardhälbed

Deskriptor	Keskväärtus	Standardhälve
X3A	0.191342	0.02084
P_VSA_ppp_A	79.264167	46.409147
SpDiam_EA(bo)	6.979475	0.588881
don_O_2B	0.827899	0.883269
acc_N_5Bc	-0.647774	0.495288
RDF030s	43.980907	31.370803
R6v+	0.017489	0.008269
Mor22p	-0.011015	0.21534
MATS5m	-0.065701	0.268911
GATS1m	0.693467	0.168163
Mor26m	-0.135897	0.294119
R6uplus	0.038795	0.016742
fdonlipo3A	1.40942	1.755669
GATS3p	1.033141	0.281094



Joonis S1. Treeningkomplekti skaleeritud deskriptorite distributsioonid

Litsents

Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja üldsusele kättesaadavaks tegemiseks

Mina, **Mihkel Kotli**,

(autori nimi)

1. annan Tartu Ülikoolile tasuta loa (lihtlitsentsi) minu loodud teose
Pestitsiidide toksilisuse ennustamine organismile *Eisenia fetida* ,
mille juhendaja on Geven Piir,
reprodutseerimiseks eesmärgiga seda säilitada, sealhulgas lisada digitaalarhiivi DSpace kuni autoriõiguse kehtivuse lõppemiseni.
2. Annan Tartu Ülikoolile loa teha punktis 1 nimetatud teos üldsusele kättesaadavaks Tartu Ülikooli veebikeskkonna, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace kaudu Creative Commons'i litsentsiga CC BY NC ND 3.0, mis lubab autorile viidates teost reprodutseerida, levitada ja üldsusele suunata ning keelab luua tuletatud teost ja kasutada teost ärieesmärgil, kuni autoriõiguse kehtivuse lõppemiseni.
3. Olen teadlik, et punktides 1 ja 2 nimetatud õigused jäävad alles ka autorile.
4. Kinnitan, et lihtlitsentsi andmisega ei riku ma teiste isikute intellektuaalomandi ega isikuandmete kaitse õigusaktidest tulenevaid õigusi.

Mihkel Kotli

22.02.2022