

Clarke,

SUPERINTENDENCIA DE INDUSTRIA Y COMERCIO



No. 07-050824-A-00002-0000

Fecha: 2012-11-19 15:36:20 Dep. 2020 DIR.NUEVASCR
Tra. 11 PATENTEIYII Eve: 379 FASENACIONALII
Act. 444 RESPUESTAREQUE Folios: 24

1

P-3409

SUPERINTENDENCIA DE INDUSTRIA Y COMERCIO
DIVISION DE NUEVAS CREACIONES

E. S. D.

Re: Expediente No. 07.050.824A
Solicitud de patente a nombre de **ENDORECHERCHE, INC.**

Yo, DILIA RODRIGUEZ D'ALEMAN, identificada como aparece al pie de mi firma, domiciliada en la carrera 11 No. 86-53, piso 6, obrando como apoderada de la sociedad **ENDORECHERCHE, INC.**, domiciliada en Quebec, Canadá, solicitante de la patente de la referencia, en respuesta al oficio No. 15023 notificado por fijación en lista el 28 de agosto de 2012, me permito manifestar:

1. Con fundamento en la facultad que confiere el artículo 34 de la Decisión 486 al solicitante para modificar la solicitud de patente en cualquier momento del trámite, presento junto con este memorial un nuevo capítulo reivindicatorio, el cual consta de 1 a 16 reivindicaciones y reemplaza en su totalidad el capítulo reivindicatorio presentado anteriormente.

En cuanto a estas modificaciones, me permito decir que las mismas no amplían de ninguna manera la materia objeto de la presente solicitud y se realizaron con el ánimo de superar las objeciones a la claridad, planteadas por el examinador en su concepto técnico.

2. Claridad de la Solicitud

El solicitante adjunta un nuevo capítulo reivindicatorio con el cual subsana las objeciones presentadas por el examinador.

El solicitante quisiera llamar la atención del examinador a los “códigos de laboratorio” empelados en las reivindicaciones 1 y 13. Al respecto, es necesario anotar que, como se puede observar en las fichas técnicas adjuntas, los códigos mencionados corresponden a los número de identificación CAS de los compuestos, por lo que el experto con habilidad ordinaria en la materia puede identificar fácilmente los productos empleados.

En relación con el rango de la reivindicación 6, el experto con habilidad ordinaria en la materia no tendrá ningún problema en entender que se trata de un rango superior

P-2409

a 0 pero no mayor al 2%, por lo tanto el solicitante considera que el mismo es perfectamente claro. Por último, en relación con la objeción del examinador respecto a la falta de soporte, el solicitante quisiera anotar que la norma no obliga en ningún momento a presentar soporte experimental para todas y cada una de las modalidades de la invención. Por otro lado, la presente solicitud no reclama productos farmacéuticos nuevos, sino una combinación nueva de productos farmacéuticos ampliamente conocidos.

La suficiencia de la solicitud está dada por la presencia de todos y cada uno de los compuestos tanto en las reivindicaciones como en la descripción, no porque se presente sustento experimental para todas y cada una de las composiciones reclamadas.

3. Falta de Unidad

El examinador objeta la unidad de la solicitud, argumentando que cada una de las posibles combinaciones constituye una invención independiente sin ofrece suficientes argumentos técnicos que sustenten su objeción.

Al respecto, el solicitante quisiera anotar que la presente solicitud reclama una composición que comprende un precursor esteroide sexual y un modulador selectivo del receptor de estrógeno. Con esto en mente, se puede observar que los supuestos grupos independientes no son tal, ya que todos se comprenden un concepto común inventivo: corresponden a una combinación de un precursor esteroide sexual y un modulador selectivo del receptor de estrógeno.

En vista de lo anterior, el solicitante no considera debidamente justificada la objeción del examinador, ya que no existe evidencia técnica alguna que demuestre que las diferentes combinaciones mencionadas en el oficio no presentan un concepto inventivo común.

4. Falta de Novedad

Con el fin de subsanar la objeción a la novedad, el solicitante ha eliminado la reivindicación 14 del nuevo capítulo reivindicatorio adjunto.

5. Falta de Altura Inventiva

El examinador objeta la altura inventiva de la presente solicitud, argumentando que las anterioridades D2, D3 y D4 combinadas con la anterioridad D1 le permiten al experto con habilidad en la materia derivar de manera obvia el objeto de la presente solicitud.

Al respecto, el solicitante quisiera anotar lo siguiente:

En primer lugar, el examinador argumenta que *“la persona del oficio normalmente versada en la materia, se vería motivada por lo revelado en D2 a formular la combinación revelada en D1 en una forma farmacéutica para aplicación local en la vagina, con la expectativa razonable de obtener una composición para prevenir el cáncer de mama y tratar de reducir la probabilidad de adquirir problemas que afectan la lámina propia o capa muscular de la vagina, porque ya era conocido el efecto sinérgico de la combinación de un precursor esteroide sexual como DHEA y un modulador selectivo del receptor de estrógeno en la prevención del cáncer de mama y el documento D2 revela que la administración de DHEA resulta en cambios histológicos en los tejidos vaginal y uterino afectado los diferentes tipos de células.”*

Para el solicitante no es claro exactamente en que se basa el examinador para afirmar que la presente solicitud se relaciona con el tratamiento del cáncer de mama. La descripción es clara, al establecer el objeto de la solicitud como una composición para mejorar la lubricación vaginal después de la menopausia, con el beneficio adicional de prevenir la aparición de resequeidad vaginal y ofrecer, paralelamente, un tratamiento hormonal que ofrece otros beneficios secundarios que no constituyen el objeto principal de la solicitud.

Por otro lado, ninguna de las anterioridades D1 y D2 enseña o sugiere que la combinación de un precursor esteroide sexual y un modulador selectivo del receptor de estrógeno tenga algún efecto sobre la resequeidad vaginal y otras enfermedades del tejido vaginal relacionadas con la menopausia.

En segundo lugar, es necesario anotar que ninguna de las anterioridades enseña o sugiere una composición como la que se reclama para aplicación vaginal. El arte previo citado por el examinador enseña composiciones similares por ingestión oral o medicamentos a base de DHEA para aplicación vaginal, pero la única forma en que la combinación reclamada pueda ser evidente a partir del estado del arte es a través de un estudio retrospectivo de la solicitud. El experto con habilidad en la materia no tenía forma de saber, al momento de desarrollar la invención, si el precursor esteroide sexual podía o no aplicarse sobre el tejido vaginal; de hecho, toda la evidencia apuntaba a lo contrario ya que las formulaciones conocidas que contenían precursores esteroides sexuales solo se formulaban para administración oral.

Tercero, las composiciones enseñadas en los documentos D2 y D4 son para su uso inmediatamente previo al momento de tener relaciones sexuales, ya que sus efectos son cortos. Por su parte, la composición reclamada tiene un efecto más duradero y puede llegar a eliminar el problema una vez se completa el tratamiento. La sinergia entre los componentes de la invención es clara para el experto con habilidad ordinaria en la materia: **El efecto es a largo plazo.** Nada

Clarke, Modet & Cº

COLOMBIA

4

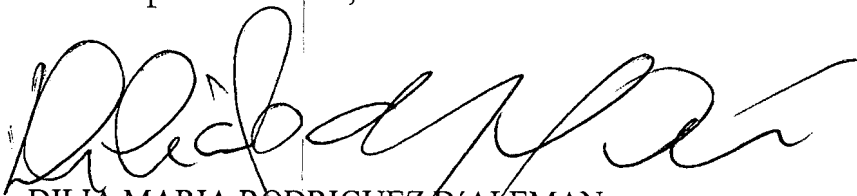
en las anterioridades D1 a D4 enseña o sugiere que exista una forma de solucionar el problema de resequedad vaginal a largo plazo, ya que las soluciones proporcionadas en dichos documentos son a corto plazo. El experto con habilidad en la materia no tendría como saber que el efecto de la combinación podía llegar a ser a largo plazo simplemente a partir de los documentos de estado del arte. Tal enseñanza solo es obvia si se realiza un estudio retrospectivo de la solicitud.

Por último, las formulaciones para aplicación percutánea son ampliamente conocidas pero esto no significa que porque el compuesto A se aplica de manera percutánea, una combinación de A con un compuesto B también pueda aplicarse de la misma forma. El experto con habilidad ordinaria en la materia sabe que existen compuestos que separados reaccionan de una forma pero al combinarse reaccionan de manera completamente diferente. Antes del desarrollo de la presente invención, el experto con habilidad ordinaria en la materia no tenía forma de saber cuál era la mejor forma de administrar la composición reclamada.

De hecho, hasta el momento del desarrollo de la presente invención, el experto con habilidad ordinaria en la materia no tenía forma de saber si la composición reclamada tendría el efecto descrito en la solicitud, ya que ningún documento del estado del arte anticipa una composición como la reclamada para efectuar un tratamiento como el descrito.

En resumen, me permito decir que gracias a las modificaciones expuestas en el punto 1 de este memorial y los argumentos anteriormente mencionados, la presente solicitud cumple cabalmente con el requisito de claridad, unidad, novedad y altura inventiva respecto a la composición expuesta en el capítulo reivindicatorio adjunto. Por lo tanto, solicito comedidamente a ese despacho se sirva reconocer estos requisitos y conceder el privilegio de patente de invención a la solicitud en estudio.

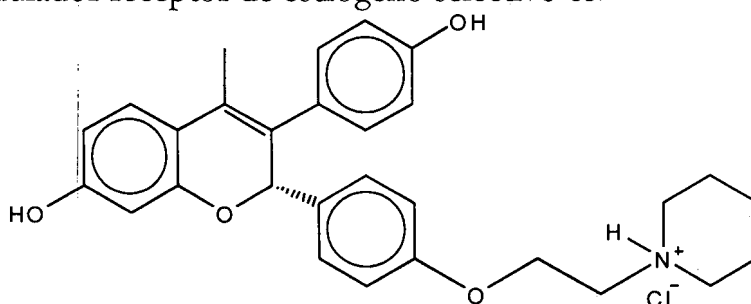
Señor Superintendente,



DILIA MARIA RODRIGUEZ D'ALEMAN
C.C. 41.654.882 de Bogotá
T.P. 20824 del C.S.J.
notificaciones@clarkemodet.com.co

REIVINDICACIONES

1. Una composición farmacéutica para aplicación vaginal que comprende:
 - (a) un excipiente, diluyente o vehículo farmacéuticamente aceptable;
 - (b) una cantidad terapéuticamente efectiva de al menos un precursor esteroide sexual seleccionado del grupo que consiste de dehidroepiandrosterona, sulfato de dehidroepiandrosterona, y androst-5-ene-3 β ,17 β -diol; y
 - (c) una cantidad terapéuticamente efectiva de al menos un modulador selectivo del receptor de estrógeno para la protección de la glándula uterina y mamaria contra el cáncer, en donde el modulador selectivo del receptor de estrógeno es seleccionado del grupo que consiste de Raloxifeno, Arzoxifeno (LY 353381), LY 335563, Tamoxifeno, OH-Tamoxifeno, Droloxifeno, Toremifeno, Idoxifeno, Ospemifeno, GW 5638, SERM 3339, TSE-424, ERA-923, Lasofoxifeno (CP 336156), Levormeloxifeno, Acolbifeno (EM-1538), EM-652 y EM-800.
2. La composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 1 en donde el portador, diluyente ó excipiente es un gel.
3. La composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 1, en donde la composición farmacéutica es un supositorio o un óvulo.
4. La composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 1 en donde dicho modulador receptor de estrógeno selectivo es:



5. La composición farmacéutica de acuerdo con cualquiera de las anteriores reivindicaciones 1 a 4 en donde el precursor esteroide sexual es dehidroepiandrosterona.
6. Una composición farmacéutica de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 5 en donde el precursor esteroide sexual comprende hasta 2% en peso con relación al peso total de la composición.
7. Una composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 6 en donde la cantidad del precursor esteroide sexual es 0.66 a 2.0% en peso.

6

8. Una composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 6 ó 7 en donde el excipiente, diluyente o vehículo farmacéuticamente aceptable es lipofílico.

9. Una composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 6, 7 u 8 en donde el excipiente, diluyente ó vehículo se selecciona del grupo que consiste de bases Witepsol (que incluye Witepsol H-15), fattibase, Wecobee, manteca de cacao, aceite de theobroma, y combinaciones de las mismas.

10. Una composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 9 en donde el excipiente, diluyente ó vehículo es Witepsol H-15.

11. Una composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 9 en donde el excipiente, diluyente ó vehículo es Witepsol H-15 y el precursor esteroide sexual es dehidroepiandrosterona.

12. Una composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 9 en la forma de un supositorio u óvulo en donde el excipiente, diluyente ó vehículo es Witepsol H-15 y el precursor esteroide sexual es dehidroepiandrosterona.

13. Una composición farmacéutica para aplicación percutánea que comprende:

(a) un excipiente, diluyente o vehículo farmacéuticamente aceptable;

(b) una cantidad terapéuticamente efectiva de al menos un precursor esteroide sexual seleccionado del grupo que consiste de dehidroepiandrosterona, sulfato de dehidroepiandrosterona, y androst-5-ene-3 β ,17 β -diol; y

(c) una cantidad terapéuticamente efectiva de al menos un modulador selectivo del receptor de estrógeno para la protección de la glándula uterina y mamaria contra el cáncer, en donde el modulador selectivo del receptor de estrógeno es seleccionado del grupo que consiste de Raloxifeno, Arzoxifeno (LY 353381), LY 335563, Tamoxifeno, OH-Tamoxifeno, Droloxifeno, Toremifeno, Idoxifeno, Ospemifeno, GW 5638, SERM 3339, TSE-424, ERA-923, Lasofoxifeno (CP 336156), Levormeloxifeno, Acolbifeno (EM-1538), EM-652 y EM-800.

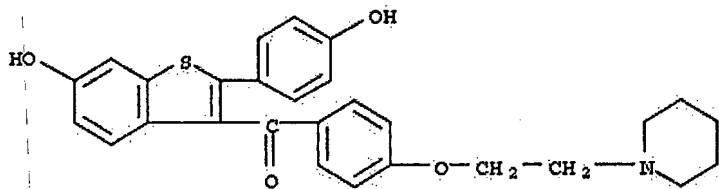
14. Una composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 13, en donde el modulador selectivo del receptor de estrógeno es acolbifeno.

15. Una composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 13, en donde el precursor esteroide sexual es dehidroepiandrosterona.

16. Una composición farmacéutica de acuerdo con la reivindicación 13 en donde el precursor esteroide sexual es dehidroepiandrosterona y el modulador selectivo del receptor de estrógeno es acolbifeno.

6

CAS Registry Number: 84449-90-1
C₂₈H₂₇N₁O₄S
Methanone, [6-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)benzo[b]thien-3-yl][4-[2-(1-piperidinyl)ethoxy]phenyl]-
Keoxifene; LY 139481; Raloxifene; [2-(4-Hydroxyphenyl)-6-hydroxybenzo[b]thien-3-yl][4-(2-(1-piperidinyl)ethoxy)phenyl]methanone.



~2,480 References

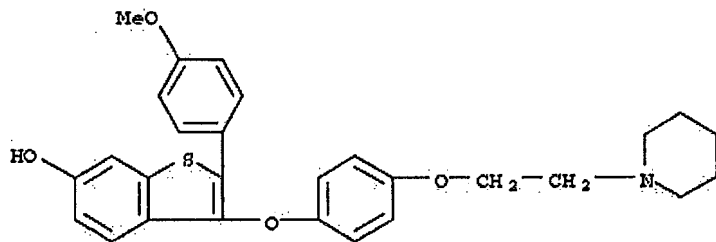
Document Types: Conference, Dissertation, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Formation, Nonpreparative		✓		✓
Miscellaneous	✓	✓		
Occurrence		✓	✓	
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓		✓
Properties	✓	✓	✓	✓
Prophetic in Patents	✓		✓	
Reactant or Reagent	✓	✓		
Uses	✓	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	1.39	pH 1 Temp: 25 °C	(15)
Bioconcentration Factor	1.39	pH 2 Temp: 25 °C	(15)
Bioconcentration Factor	1.39	pH 3 Temp: 25 °C	(15)
Bioconcentration Factor	1.44	pH 4 Temp: 25 °C	(15)
Bioconcentration Factor	1.93	pH 5 Temp: 25 °C	(15)
Bioconcentration Factor	6.75	pH 6 Temp: 25 °C	(15)
Bioconcentration Factor	52.3	pH 7 Temp: 25 °C	(15)
Bioconcentration Factor	327	pH 8 Temp: 25 °C	(15)
Bioconcentration Factor	298	pH 9 Temp: 25 °C	(15)
Bioconcentration Factor	15.0	pH 10 Temp: 25 °C	(15)
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	5.79	pH 1 Temp: 25 °C	(15)
Koc	5.79	pH 2 Temp: 25 °C	(15)
Koc	5.81	pH 3 Temp: 25 °C	(15)
Koc	6.01	pH 4 Temp: 25 °C	(15)

CAS Registry Number: 182133-25-1
C₂₈H₂₉N O₄S
Benzo[b]thiophene-6-ol, 2-(4-methoxyphenyl)-3-[4-[2-(1-piperidinyl)ethoxy]phenoxy]-
Arzoxifene; LY-353381



Source of Registration: CA
~196 References
Document Types: Conference, Dissertation, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents
Analytical Study		✓	
Biological Study	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓	
Process	✓	✓	
Properties	✓	✓	
Reactant or Reagent	✓	✓	
Uses	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	383	pH 1 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	383	pH 2 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	384	pH 3 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	390	pH 4 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	450	pH 5 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	1050	pH 6 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	6950	pH 7 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	55500	pH 8 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	1.71E5	pH 9 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	61800	pH 10 Temp: 25 °C	(2)

Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	323	pH 1 Temp: 25 °C	(2)
Koc	323	pH 2 Temp: 25 °C	(2)
Koc	324	pH 3 Temp: 25 °C	(2)
Koc	329	pH 4 Temp: 25 °C	(2)
Koc	380	pH 5 Temp: 25 °C	(2)
Koc	887	pH 6 Temp: 25 °C	(2)
Koc	5860	pH 7 Temp: 25 °C	(2)

CAS Registry Number: 318295-61-3

Unspecified

LY 335563 (9CI)

Manual Registration

Editor Note: An non-steroidal antiestrogen (Eli Lilly)

No Structure Diagram Available

Source of Registration: CA

~4 References

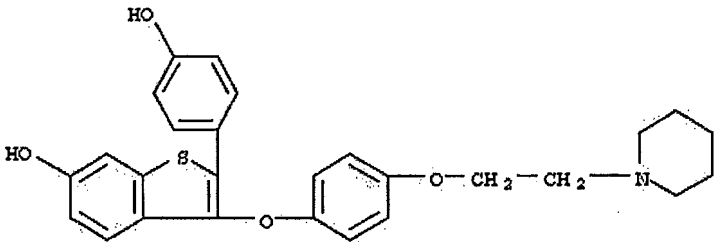
Document Type: Patent

CAS Role	Patents
Biological Study	✓
Uses	✓

Copyright © 2010 American Chemical Society (ACS). All Rights Reserved.

Desmethyl argoxifene

CAS Registry Number: 176672-18-7
C₂₇H₂₇N O₄S
Benzo[b]thiophene-6-ol, 2-(4-hydroxyphenyl)-3-[4-[2-(1-piperidinyl)ethoxy]phenoxy]-
Desmethylarzoxifene



Source of Registration: CA
~27 References
Document Types: Journal, Patent

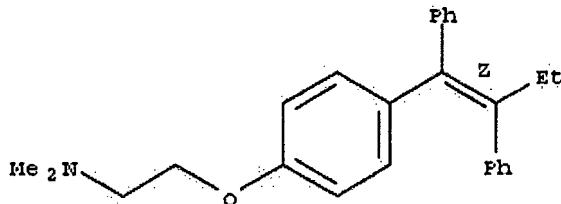
CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study		✓		✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓		
Process	✓			
Properties		✓		
Reactant or Reagent	✓	✓		
Uses	✓	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	136	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	136	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	136	pH 3 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	139	pH 4 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	160	pH 5 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	374	pH 6 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	2460	pH 7 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	18900	pH 8 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	45300	pH 9 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	5800	pH 10 Temp: 25 °C	(1)

Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	154	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Koc	154	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Koc	154	pH 3 Temp: 25 °C	(1)
Koc	157	pH 4 Temp: 25 °C	(1)
Koc	181	pH 5 Temp: 25 °C	(1)
Koc	423	pH 6 Temp: 25 °C	(1)
Koc	2790	pH 7 Temp: 25 °C	(1)

CAS Registry Number: 10540-29-1
C₂₆H₂₉N₂O
Ethanamine, 2-[4-[(1Z)-1,2-diphenyl-1-buten-1-yl]phenoxy]-N,N-dimethyl-
Ethanamine, 2-[4-(1,2-diphenyl-1-butenyl)phenoxy]-N,N-dimethyl-, (Z)-; Ethanamine, 2-[4-[(1Z)-1,2-diphenyl-1-butenyl]phenoxy]-N,N-dimethyl-, (9CI); Ethylamine, 2-[p-(1,2-diphenyl-1-butenyl)phenoxy]-N,N-dimethyl-, (Z)- (8CI); (Z)-2-[4-(1,2-Diphenyl-1-butenyl)phenoxy]-N,N-dimethylethanamine; ICI 47699; Mammaton; Novaldex; Tamoxifen; Z-Tamoxifen; trans-Tamoxifen



Double bond geometry as shown.

~10,391 References

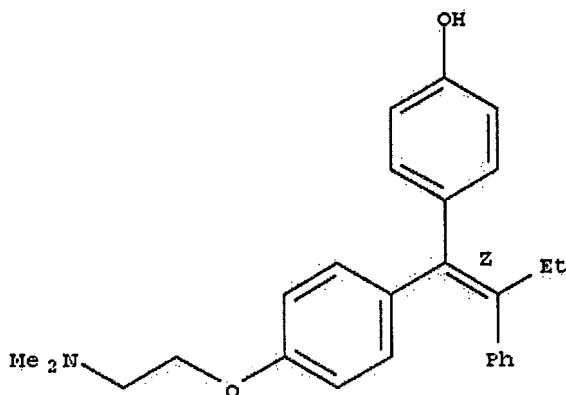
Document Types: Book, Conference, Dissertation, Journal, Patent, Preprint

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Combinatorial Study		✓		
Formation, Nonpreparative		✓		✓
Miscellaneous	✓	✓		
Occurrence	✓	✓		✓
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	✓
Prophetic in Patents	✓		✓	
Reactant or Reagent	✓	✓		✓
Uses	✓	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	3.73	pH 1 Temp: 25 °C	(28)
Bioconcentration Factor	3.73	pH 2 Temp: 25 °C	(28)
Bioconcentration Factor	3.74	pH 3 Temp: 25 °C	(28)
Bioconcentration Factor	3.82	pH 4 Temp: 25 °C	(28)
Bioconcentration Factor	4.68	pH 5 Temp: 25 °C	(28)
Bioconcentration Factor	13.3	pH 6 Temp: 25 °C	(28)
Bioconcentration Factor	97.4	pH 7 Temp: 25 °C	(28)
Bioconcentration Factor	797	pH 8 Temp: 25 °C	(28)
Bioconcentration Factor	3150	pH 9 Temp: 25 °C	(28)
Bioconcentration Factor	4470	pH 10 Temp: 25 °C	(28)
Chemical Properties	Value	Condition	Note

CAS Registry Number: 68047-06-3
C₂₆H₂₉N₂O₂
Phenol, 4-[(1Z)-1-[4-[2-(dimethylamino)ethoxy]phenyl]-2-phenyl-1-buten-1-yl]-
Phenol, 4-[(1Z)-1-[4-[2-(dimethylamino)ethoxy]phenyl]-2-phenyl-1-butenyl]- (9CI); Phenol, 4-[1-[4-[2-(dimethylamino)ethoxy]phenyl]-2-phenyl-1-butenyl]-; (Z)-; (Z)-4-Hydroxytamoxifen; 4-Hydroxy-(Z)-tamoxifen; 4-Hydroxytamoxifen; 4-[(1Z)-1-[4-[2-(dimethylamino)ethoxy]phenyl]-2-phenyl-1-butenyl]phenol; Hydroxytamoxifen; ICI 79280; trans-4-Hydroxytamoxifen; trans-Hydroxytamoxifen
Deleted CAS Registry Numbers: 65213-48-1; 72732-26-4; 76276-99-8



Double bond geometry as shown.

~1,779 References

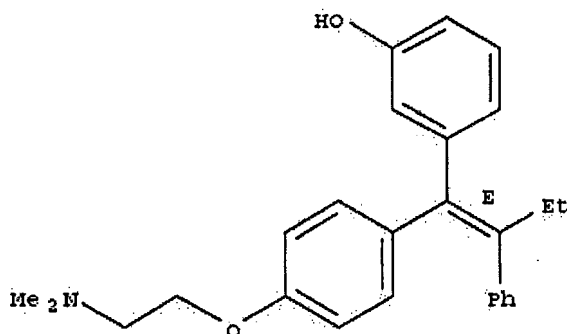
Document Types: Conference, Dissertation, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓		✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Formation, Nonpreparative	✓	✓		
Occurrence		✓		✓
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓		✓
Prophetic in Patents	✓			
Reactant or Reagent	✓	✓		
Uses	✓	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	2.60	pH 1 Temp: 25 °C	(8)
Bioconcentration Factor	2.60	pH 2 Temp: 25 °C	(8)
Bioconcentration Factor	2.61	pH 3 Temp: 25 °C	(8)
Bioconcentration Factor	2.67	pH 4 Temp: 25 °C	(8)
Bioconcentration Factor	3.28	pH 5 Temp: 25 °C	(8)
Bioconcentration Factor	9.40	pH 6 Temp: 25 °C	(8)
Bioconcentration Factor	69.3	pH 7 Temp: 25 °C	(8)
Bioconcentration Factor	564	pH 8 Temp: 25 °C	(8)

CAS Registry Number: 82413-20-5
 $C_{26}H_{29}NO_2$
Phenol, 3-[(1E)-1-[4-[2-(dimethylamino)ethoxy]phenyl]-2-phenyl-1-buten-1-yl]-
Phenol, 3-[(1E)-1-[4-[2-(dimethylamino)ethoxy]phenyl]-2-phenyl-1-butenyl]- (9CI); Phenol, 3-[1-[4-[2-(dimethylamino)ethoxy]phenyl]-2-phenyl-1-butenyl]-, (E)-; 3-Hydroxytamoxifen; Droloxifene; E-Droloxifene; K 060; K 060E; K 21.060E
Deleted CAS Registry Numbers: 887501-03-3



Double bond geometry as shown.

~458 References

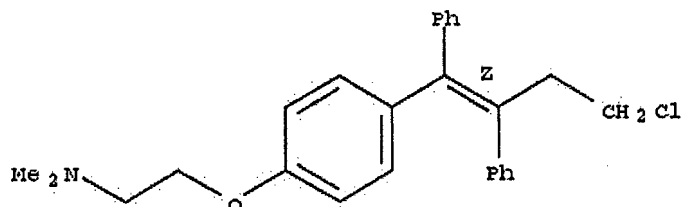
Document Types: Conference, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study		✓		
Biological Study	✓	✓	✓	
Preparation	✓	✓		✓
Process	✓	✓		
Properties	✓	✓		
Reactant or Reagent	✓	✓		
Uses	✓	✓	✓	

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	2.27	pH 1 Temp: 25 °C	(5)
Bioconcentration Factor	2.27	pH 2 Temp: 25 °C	(5)
Bioconcentration Factor	2.27	pH 3 Temp: 25 °C	(5)
Bioconcentration Factor	2.33	pH 4 Temp: 25 °C	(5)
Bioconcentration Factor	2.87	pH 5 Temp: 25 °C	(5)
Bioconcentration Factor	8.24	pH 6 Temp: 25 °C	(5)
Bioconcentration Factor	60.8	pH 7 Temp: 25 °C	(5)
Bioconcentration Factor	489	pH 8 Temp: 25 °C	(5)
Bioconcentration Factor	1670	pH 9 Temp: 25 °C	(5)
Bioconcentration Factor	1060	pH 10 Temp: 25 °C	(5)
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	8.23	pH 1 Temp: 25 °C	(5)
Koc	8.23	pH 2 Temp: 25 °C	(5)
Koc	8.25	pH 3 Temp: 25 °C	(5)

CAS Registry Number: 89778-26-7
C₂₆H₂₈ClNO
Ethanamine, 2-[4-[(1Z)-4-chloro-1,2-diphenyl-1-buten-1-yl]phenoxy]-N,N-dimethyl-
Ethanamine, 2-[4-(4-chloro-1,2-diphenyl-1-butenyl)phenoxy]-N,N-dimethyl-, (Z)-; Ethanamine, 2-[4-[(1Z)-4-chloro-1,2-diphenyl-1-butenyl]phenoxy]-N,N-dimethyl-, (9CI); Acapodene; Farestone; GTx 006; Toremifene; Z-Toremifene
Deleted CAS Registry Numbers: 98644-21-4



Double bond geometry as shown.

~996 References

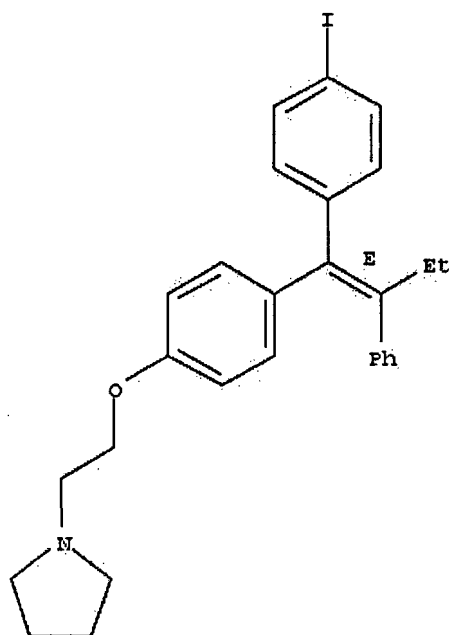
Document Types: Conference, Dissertation, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study		✓		✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Occurrence		✓		
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓		
Properties	✓	✓		✓
Prophetic in Patents	✓			
Reactant or Reagent	✓	✓		
Uses	✓	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	406	pH 1 Temp: 25 °C	(11)
Bioconcentration Factor	406	pH 2 Temp: 25 °C	(11)
Bioconcentration Factor	407	pH 3 Temp: 25 °C	(11)
Bioconcentration Factor	417	pH 4 Temp: 25 °C	(11)
Bioconcentration Factor	512	pH 5 Temp: 25 °C	(11)
Bioconcentration Factor	1460	pH 6 Temp: 25 °C	(11)
Bioconcentration Factor	10700	pH 7 Temp: 25 °C	(11)
Bioconcentration Factor	87700	pH 8 Temp: 25 °C	(11)
Bioconcentration Factor	3.44E5	pH 9 Temp: 25 °C	(11)
Bioconcentration Factor	4.87E5	pH 10 Temp: 25 °C	(11)
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	337	pH 1 Temp: 25 °C	(11)
Koc	337	pH 2 Temp: 25 °C	(11)
Koc	338	pH 3 Temp: 25 °C	(11)
Koc	346	pH 4 Temp: 25 °C	(11)

CAS Registry Number: 116057-75-1
C₂₈H₃₀I₂NO
Pyrrolidine, 1-[2-[4-[(1E)-1-(4-iodophenyl)-2-phenyl-1-buten-1-yl]phenoxy]ethyl]-
Pyrrolidine, 1-[2-[4-[(1E)-1-(4-iodophenyl)-2-phenyl-1-butenyl]phenoxy]ethyl]- (9CI); Pyrrolidine, 1-[2-[4-[1-(4-iodophenyl)-2-phenyl-1-butenyl]phenoxy]ethyl]-, (E)-; CB 7432; Idoxifene; SB 223030
Deleted CAS Registry Numbers: 531553-45-4



Double bond geometry as shown.

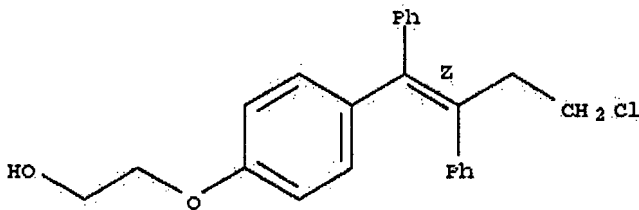
Source of Registration: CA
~304 References
Document Types: Conference, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓		
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓		✓
Process	✓	✓		
Properties	✓	✓		
Reactant or Reagent		✓		
Uses	✓	✓	✓	

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	7740	pH 1 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	7750	pH 2 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	7750	pH 3 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	7770	pH 4 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	7980	pH 5 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	10100	pH 6 Temp: 25 °C	(2)

CAS Registry Number: 128607-22-7
C₂₄H₂₃ClO₂
Ethanol, 2-[4-[(1Z)-4-chloro-1,2-diphenyl-1-buten-1-yl]phenoxy]-
Ethanol, 2-[4-(4-chloro-1,2-diphenyl-1-butenyl)phenoxy]-, (Z)-; Ethanol, 2-[4-[(1Z)-4-chloro-1,2-diphenyl-1-butenyl]phenoxy]- (9CI);
FC 1271a; Fc 1271; Ospemifene



Double bond geometry as shown.

Source of Registration: CA
~86 References
Document Types: Conference, Dissertation, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents
Analytical Study		✓	
Biological Study	✓	✓	✓
Formation, Nonpreparative		✓	
Miscellaneous		✓	
Preparation	✓	✓	
Process	✓	✓	
Properties	✓	✓	
Prophetic in Patents	✓		
Reactant or Reagent	✓		
Uses	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

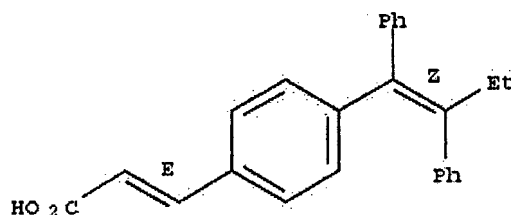
Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 3 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 4 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 5 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 6 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 7 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 8 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 9 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.19E5	pH 10 Temp: 25 °C	(1)
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	1.50E5	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Koc	1.50E5	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Koc	1.50E5	pH 3 Temp: 25 °C	(1)

CAS Registry Number: 155701-61-4

C₂₅H₂₂O₂

2-Propenoic acid, 3-[4-[(1Z)-1,2-diphenyl-1-buten-1-yl]phenyl]-, (2E)-

2-Propenoic acid, 3-[4-(1,2-diphenyl-1-butenyl)phenyl]-, (E,Z)-; 2-Propenoic acid, 3-[4-[(1Z)-1,2-diphenyl-1-butenyl]phenyl]-, (2E)-(9CI); (E)-3-[4-[(Z)-1,2-Diphenylbut-1-enyl]phenyl]acrylic acid; DPC 974; GW 5638



Double bond geometry as shown.

Source of Registration: CA

~59 References

Document Types: Dissertation, Journal, Patent

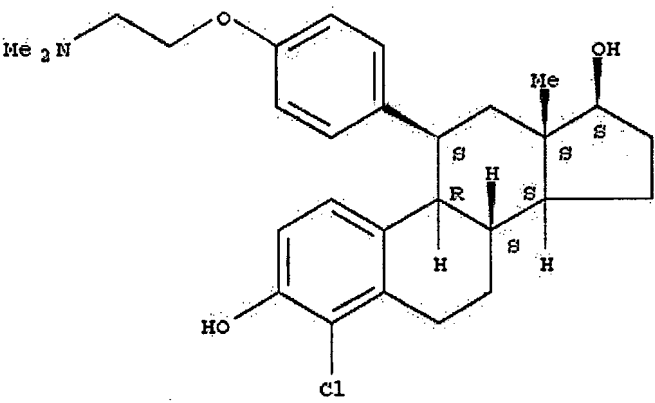
CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents
Biological Study	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓	
Process	✓		
Properties	✓		
Reactant or Reagent	✓		
Uses	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	1.00E6	pH 1 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	1.00E6	pH 2 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	1.00E6	pH 3 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	5.38E5	pH 4 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	93800	pH 5 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	10300	pH 6 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	1220	pH 7 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	305	pH 8 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	213	pH 9 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	204	pH 10 Temp: 25 °C	(2)

Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	7.52E5	pH 1 Temp: 25 °C	(2)
Koc	7.44E5	pH 2 Temp: 25 °C	(2)
Koc	6.77E5	pH 3 Temp: 25 °C	(2)
Koc	3.56E5	pH 4 Temp: 25 °C	(2)
Koc	62000	pH 5 Temp: 25 °C	(2)
Koc	6810	pH 6 Temp: 25 °C	(2)
Koc	808	pH 7 Temp: 25 °C	(2)

CAS Registry Number: 214140-51-9
C₂₈H₃₅ClN₂O₃
Estra-1,3,5(10)-triene-3,17-diol, 4-chloro-11-[4-[2-(dimethylamino)ethoxy]phenyl]-, (11β,17β)-
HMR 3339
Deleted CAS Registry Numbers: 352233-83-1



Absolute stereochemistry.

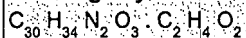
Source of Registration: CA
~24 References
Document Types: Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents
Biological Study	✓	✓	✓
Preparation	✓		
Uses	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	24.1	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	24.1	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	24.2	pH 3 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	24.7	pH 4 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	30.3	pH 5 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	85.4	pH 6 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	617	pH 7 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	4420	pH 8 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	7770	pH 9 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1700	pH 10 Temp: 25 °C	(1)
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	44.7	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Koc	44.7	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Koc	44.8	pH 3 Temp: 25 °C	(1)
Koc	45.8	pH 4 Temp: 25 °C	(1)
Koc	56.0	pH 5 Temp: 25 °C	(1)

CAS Registry Number: 198481-33-3



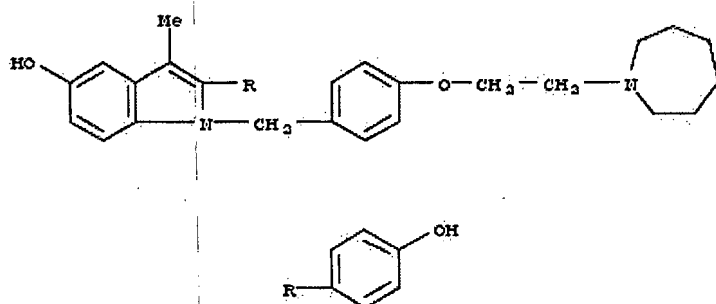
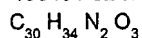
1H-Indol-5-ol, 1-[[4-[2-(hexahydro-1H-azepin-1-yl)ethoxy]phenyl]methyl]-2-(4-hydroxyphenyl)-3-methyl-, acetate (1:1)

1H-Indol-5-ol, 1-[[4-[2-(hexahydro-1H-azepin-1-yl)ethoxy]phenyl]methyl]-2-(4-hydroxyphenyl)-3-methyl-, monoacetate (salt) (9CI);

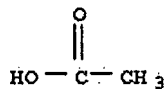
Bazedoxifene acetate; TSE 424; WAY-TES 424

Deleted CAS Registry Numbers: 252555-09-2

198481-32-2



64-19-7



Source of Registration: CA

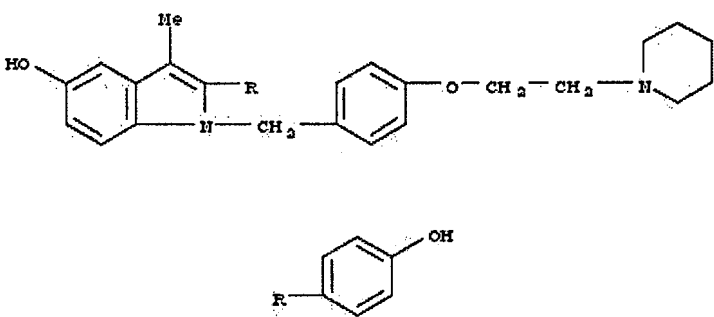
~84 References

Document Types: Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents
Analytical Study	✓		
Biological Study	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓	
Process	✓		
Properties	✓	✓	
Uses	✓	✓	✓

Copyright © 2010 American Chemical Society (ACS). All Rights Reserved.

CAS Registry Number: 198480-55-6
C₂₉H₃₂N₂O₃
1H-Indol-5-ol, 2-(4-hydroxyphenyl)-3-methyl-1-[[4-[2-(1-piperidinyl)ethoxy]phenyl]methyl]-
ERA 923; Pipendoxifene
Deleted CAS Registry Numbers: 352233-89-7



Source of Registration: CA
~48 References
Document Types: Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents
Biological Study	✓	✓	✓
Preparation	✓		
Properties	✓	✓	
Uses	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

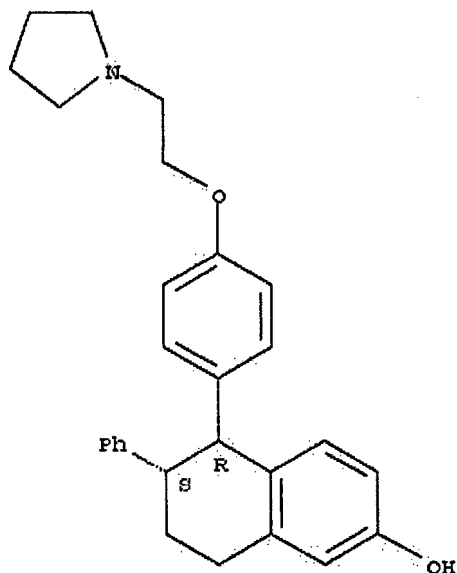
Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	17.7	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	17.7	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	17.8	pH 3 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	18.1	pH 4 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	20.9	pH 5 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	49.3	pH 6 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	329	pH 7 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	2740	pH 8 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	11200	pH 9 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	6860	pH 10 Temp: 25 °C	(1)
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	35.8	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Koc	35.9	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Koc	35.9	pH 3 Temp: 25 °C	(1)
Koc	36.5	pH 4 Temp: 25 °C	(1)
Koc	42.2	pH 5 Temp: 25 °C	(1)
Koc	99.6	pH 6 Temp: 25 °C	(1)
Koc	664	pH 7 Temp: 25 °C	(1)

CAS Registry Number: 180916-16-9

C₂₈H₃₁N O₂

2-Naphthalenol, 5,6,7,8-tetrahydro-6-phenyl-5-[4-[2-(1-pyrrolidinyl)ethoxy]phenyl]-, (5R,6S)-

2-Naphthalenol, 5,6,7,8-tetrahydro-6-phenyl-5-[4-[2-(1-pyrrolidinyl)ethoxy]phenyl]-, (5R-cis)-; Lasofoxifene



Absolute stereochemistry. Rotation (-).

Source of Registration: CA

~213 References

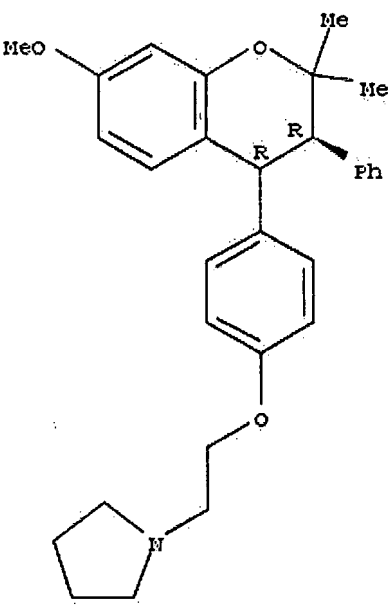
Document Types: Conference, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Miscellaneous	✓			
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓			
Properties	✓	✓	✓	
Uses	✓	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	41.4	pH 1 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	41.4	pH 2 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	41.4	pH 3 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	41.5	pH 4 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	42.6	pH 5 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	54.0	pH 6 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	167	pH 7 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	1270	pH 8 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	9720	pH 9 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	24800	pH 10 Temp: 25 °C	(2)

CAS Registry Number: 78994-23-7
C₃₀H₃₅N₃O₃
Pyrrolidine, 1-[2-[4-[(3R,4R)-3,4-dihydro-7-methoxy-2,2-dimethyl-3-phenyl-2H-1-benzopyran-4-yl]phenoxy]ethyl]-
Pyrrolidine, 1-[2-[4-(3,4-dihydro-7-methoxy-2,2-dimethyl-3-phenyl-2H-1-benzopyran-4-yl)phenoxy]ethyl]-, (3R-trans)-; (-)-
Centchroman; Levormeloxifene; l-Centchroman
Deleted CAS Registry Numbers: 790615-75-7



Absolute stereochemistry.

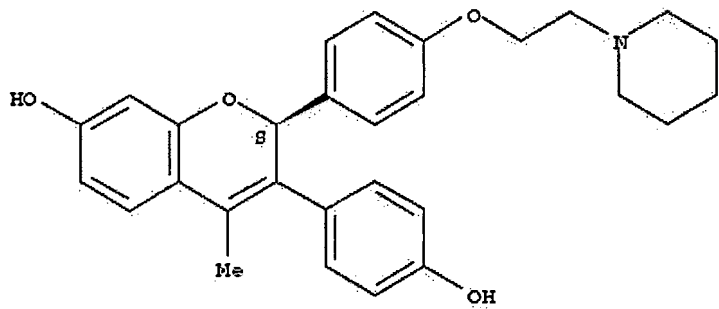
~120 References
Document Types: Conference, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study		✓		
Biological Study	✓	✓	✓	
Preparation	✓	✓		✓
Process	✓	✓		
Properties	✓	✓	✓	
Reactant or Reagent	✓	✓		
Uses	✓	✓	✓	

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	24.4	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	24.4	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	24.4	pH 3 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	24.4	pH 4 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	25.1	pH 5 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	31.8	pH 6 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	98.9	pH 7 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	754	pH 8 Temp: 25 °C	(1)

CAS Registry Number: 182167-02-8
C₂₉H₃₁N₁O₄
2H-1-Benzopyran-7-ol, 3-(4-hydroxyphenyl)-4-methyl-2-[4-[2-(1-piperidinyl)ethoxy]phenyl]-, (2S)-
2H-1-Benzopyran-7-ol, 3-(4-hydroxyphenyl)-4-methyl-2-[4-[2-(1-piperidinyl)ethoxy]phenyl]-, (S)-; Acolbifene; EM 652; Sch 57068



Absolute stereochemistry. Rotation (+).

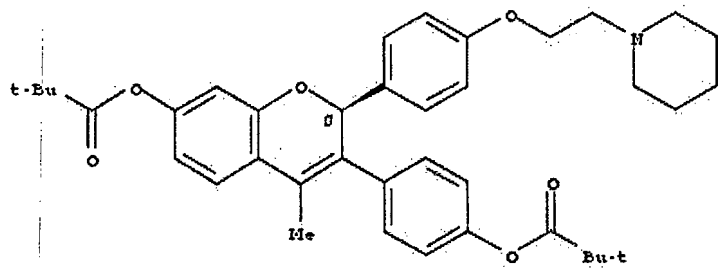
Source of Registration: CA
~118 References
Document Types: Dissertation, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents
Analytical Study		✓	
Biological Study	✓	✓	✓
Miscellaneous		✓	
Preparation	✓	✓	
Process		✓	
Properties	✓	✓	
Reactant or Reagent	✓	✓	
Uses	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	288	pH 1 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	288	pH 2 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	289	pH 3 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	294	pH 4 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	344	pH 5 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	848	pH 6 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	5790	pH 7 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	47300	pH 8 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	1.66E5	pH 9 Temp: 25 °C	(2)
Bioconcentration Factor	57900	pH 10 Temp: 25 °C	(2)
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	264	pH 1 Temp: 25 °C	(2)
Koc	264	pH 2 Temp: 25 °C	(2)
Koc	264	pH 3 Temp: 25 °C	(2)

CAS Registry Number: 182167-03-9
C₃₉H₄₇N O₆
Propanoic acid, 2,2-dimethyl-, (2S)-3-[4-(2,2-dimethyl-1-oxopropoxy)phenyl]-4-methyl-2-[4-[2-(1-piperidinyl)ethoxy]phenyl]-2H-1-benzopyran-7-yl ester
Propanoic acid, 2,2-dimethyl-, 4-[(2S)-7-(2,2-dimethyl-1-oxopropoxy)-4-methyl-2-[4-[2-(1-piperidinyl)ethoxy]phenyl]-2H-1-benzopyran-3-yl]phenyl ester (9CI); Propanoic acid, 2,2-dimethyl-, 4-[7-(2,2-dimethyl-1-oxopropoxy)-4-methyl-2-[4-[2-(1-piperidinyl)ethoxy]phenyl]-2H-1-benzopyran-3-yl]phenyl ester, (S)-, EM 800; Sch 57050
Deleted CAS Registry Numbers: 189021-25-8



Absolute stereochemistry. Rotation (+).

Source of Registration: CA
~100 References
Document Types: Dissertation, Journal, Patent

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents
Analytical Study		✓	
Biological Study	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓	
Process	✓	✓	
Properties	✓	✓	
Reactant or Reagent	✓		
Uses	✓	✓	✓

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	6670	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	6670	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	6680	pH 3 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	6800	pH 4 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	8000	pH 5 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	19900	pH 6 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.38E5	pH 7 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.00E6	pH 8 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.00E6	pH 9 Temp: 25 °C	(1)
Bioconcentration Factor	1.00E6	pH 10 Temp: 25 °C	(1)
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	2500	pH 1 Temp: 25 °C	(1)
Koc	2500	pH 2 Temp: 25 °C	(1)
Koc	2500	pH 3 Temp: 25 °C	(1)