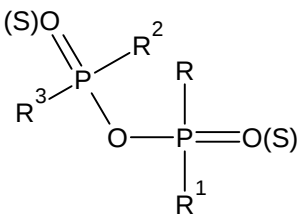
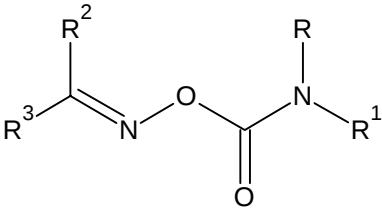
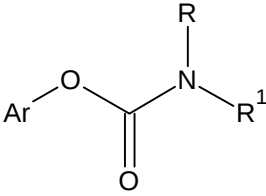
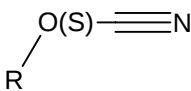
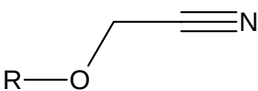
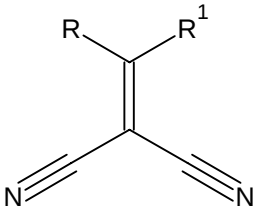
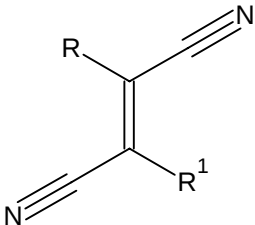
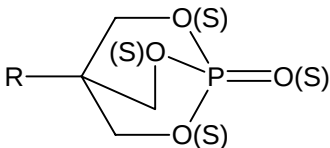
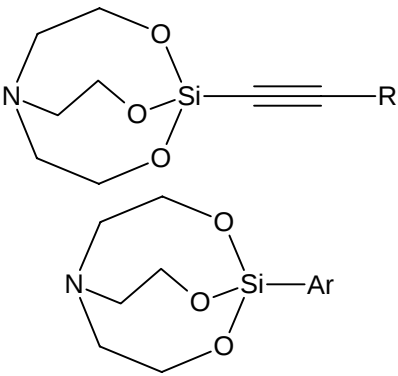
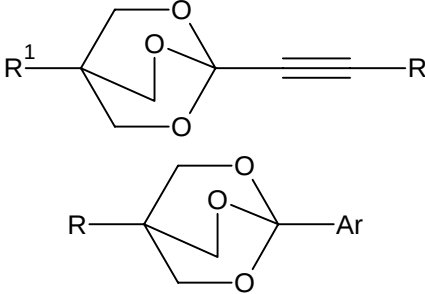
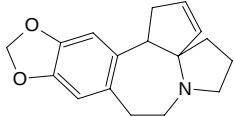
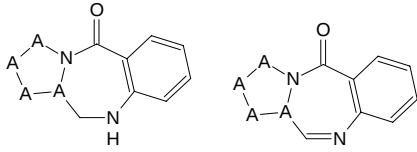
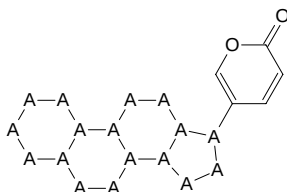
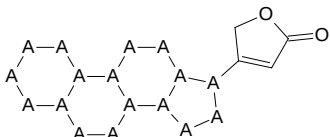
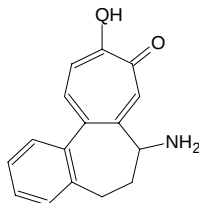


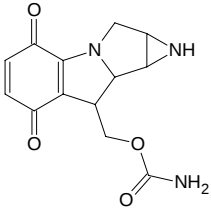
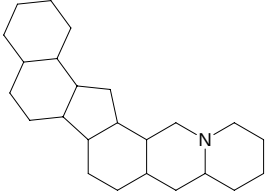
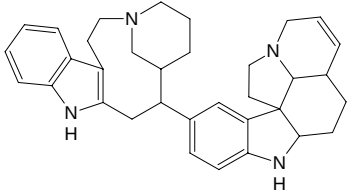
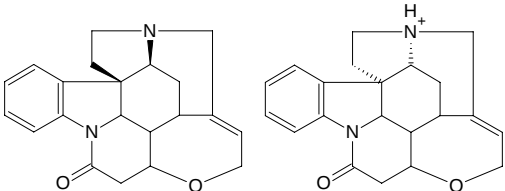
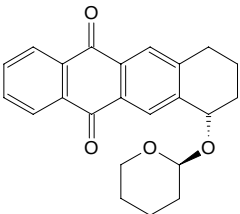
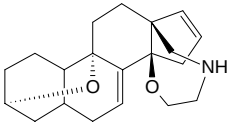
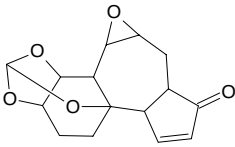
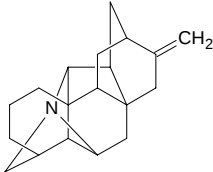
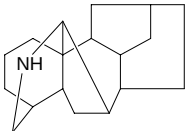
PRIEDAS NR.1

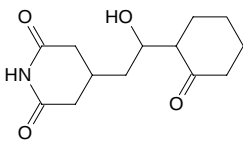
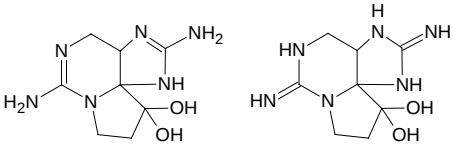
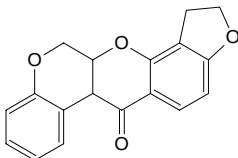
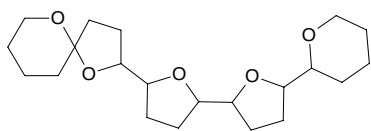
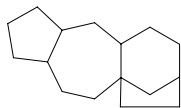
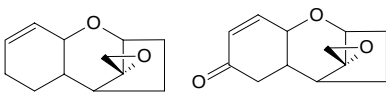
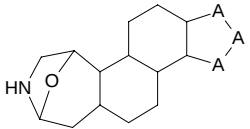
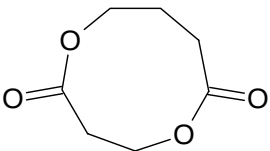
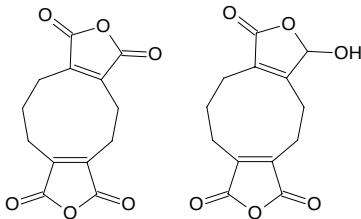
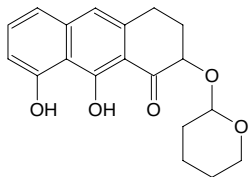
Šiame priede pateikiamas išsamus ūmaus toksiškumo (LD_{50}) modeliavime naudotų toksikoforų sąrašas. Naudojami žymėjimai: Q – bet koks heteroatomas (O, N, S); Ar – aromatinis fragmentas; A – bet koks atomas; Hal – bet koks halogenas. Išplėsta forma pavaizduoti vandenilio atomai (angl. *explicit hydrogens*) nurodo, kad atitinkamoje pozicijoje negali būti nieko kito išskyrus vandenilį.

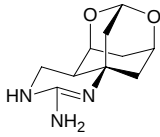
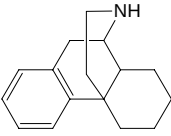
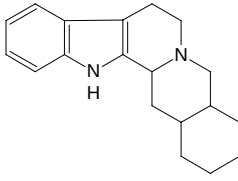
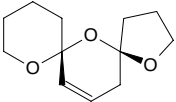
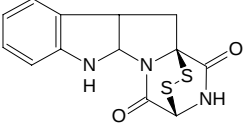
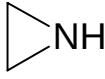
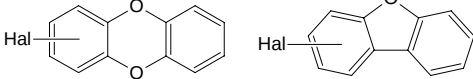
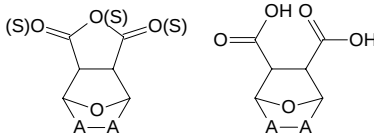
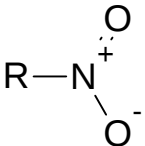
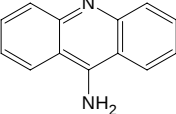
Nr.	Apibendrinta toksikoforo struktūra	Trumpas apibūdinimas
1		Garstyčių dujų analogai <i>Makromolekulių alkilinizas</i>
2		Akroleino dariniai <i>Makromolekulių alkilinizas</i>
3		Metilenhalegenidai <i>Makromolekulių alkilinizas</i>
4		Pirmo tipo aktyvuoti metilenhalegenidai <i>Makromolekulių alkilinizas</i>
5		Antro tipo aktyvuoti metilenhalegenidai <i>Makromolekulių alkilinizas</i>
6		(Tio)fosfatai <i>Acetilcholinesterazės inhibicija</i>
R ⁿ negali būti -OH, -SH, -NH ₂ grupės		

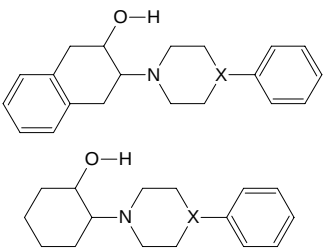
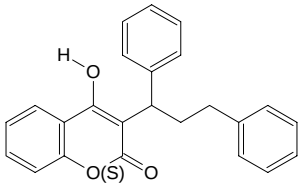
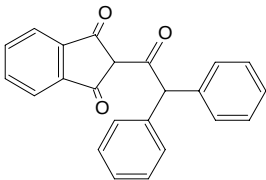
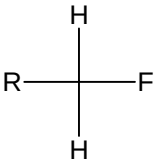
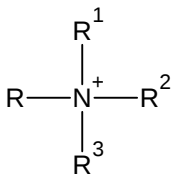
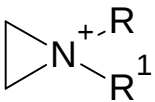
Nr.	Apibendrinta toksikoforo struktūra	Trumpas apibūdinimas
7	 R^n negali būti -OH, -SH, -NH₂ grupės	Bi(tio)fosfatai <i>Acetilcholinesterazės inhibicija</i>
8		Oksimo karbamatai <i>Acetilcholinesterazės inhibicija</i>
9		Arilkarbamatai <i>Acetilcholinesterazės inhibicija</i>
10		Pirmo tipo aktyvuoti nitrilai <i>Cianido išsiskyrimas ir kvėpavimo grandinės slopinimas</i>
11		Antro tipo aktyvuoti nitrilai <i>Cianido išsiskyrimas ir kvėpavimo grandinės slopinimas</i>
12		Metilendinitrilo fragmentas <i>Cianido išsiskyrimas ir kvėpavimo grandinės slopinimas</i>
13		Fumaronitrilo fragmentas <i>Cianido išsiskyrimas ir kvėpavimo grandinės slopinimas</i>
14		Biciklo(tio)fosfatai <i>Nekonkurentinė GABA receptoriaus inhibicija</i>

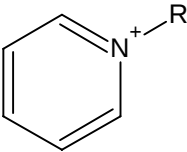
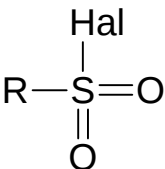
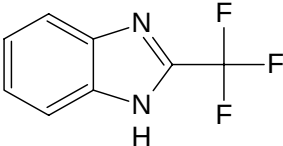
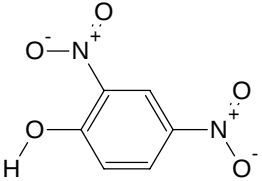
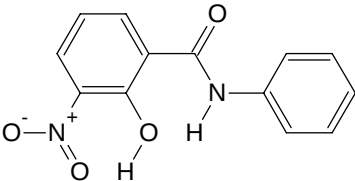
Nr.	Apibendrinta toksikoforo struktūra	Trumpas apibūdinimas
15		Silatranai <i>Nekonkurentinė GABA receptoriaus inhibicija</i>
16		Ortokarboksilatai <i>Nekonkurentinė GABA receptoriaus inhibicija</i>
17		Toksiško alkaloido cefaloetino fragmentas
18		Toksiško antibiotiko antramicino fragmentas <i>Prisijungimas prie DNR</i>
19		Bufadienolido fragmentas
20		Širdies veiklą įtakojančių vaistų, pvz., digoksino, fragmentas
21		Toksiško alkaloido kolchicino fragmentas

Nr.	Apibendrinta toksikoforo struktūra	Trumpas apibūdinimas
22		Toksiško antibiotiko mitomicino fragmentas
23		Alkaloido cevano fragmentas
24		Alkaloido vinkaleukoblastino fragmentas
25		Toksiško alkaloido strichnino fragmentas
26		Antraciklino klasės antibiotikų (doksorubicino, daunorubicino ir kt.) fragmentas
27		Kardiotoksinu ir neurotoksinu poveikiu pasižymintio batrachotoksino fragmentas
28		Gamtinio toksino simpleksino fragmentas
29		Toksiško alkaloido hetisano fragmentas
30		Toksiško alkaloido akonitano fragmentas

Nr.	Apibendrinta toksikoforo struktūra	Trumpas apibūdinimas
31		Cikloheksimido fragmentas sutinkamas toksiškuose antibiotikuose
32		Saksitoksino, gamtinio paralyžių sukeliančio toksino, fragmentas
33		Rotenono fragmentas <i>Elektronų transporto mitochondrijose inhibicija</i>
34		Toksiško antibiotiko monenzino fragmentas <i>Mitochondrijų nuodas</i>
35		Grajanotoksino fragmentas <i>Nekontroliuojamas natrio jonų kanalų sužadinimas</i>
36		Mikotoksino trichotekano fragmentas
37		Toksiško alkaloido samandarino fragmentas
38		Antibiotiko antimicino A1 fragmentas <i>Kvėpavimo grandinės nuodas</i>
39		Mikotoksinų klasei priklausančio rubratoksino fragmentas
40		Toksiško antibiotiko mitramicino fragmentas <i>Baltymų sintezės inhibicija</i>

Nr.	Apibendrinta toksikoforo struktūra	Trumpas apibūdinimas
41		Tetrodotoksino fragmentas <i>Paralyžius dėl sutrikdyto nervinių impulsų perdavimo raumenims</i>
42		Alkaloido morfinano fragmentas
43		Alkaloido johinbano fragmentas
44		Salinomicino fragmentas <i>Mitochondrijų nuodas</i>
45		Mikotoksinų klasei priklausančio verticilino fragmentas
46	Sn	Organiniai alavo junginiai
47	As	Organiniai arseno junginiai
48		Aziridino fragmentas <i>Makromolekulių alkilimas</i>
49		Halogeninto dibenzodioksino arba dibenzofurano fragmentas
50		Kantaridino arba endotalio fragmentas <i>Kepenų nuodas</i>
51	 R – bent jau pirmame sluoksnyje turi alifatinį anglies atomą	Nitro junginiai <i>Toksinis poveikis kepenims</i>
52		9-Akridinamino fragmentas

Nr.	Apibendrinta toksikoforo struktūra	Trumpas apibūdinimas
53	 X – azoto arba anglies atomas	Vezamikolio fragmentas <i>Acetilcholino atsargų kaupimo mechanizmo sutrikdymas</i>
54		Oksotremorino fragmentas <i>CNS nuodas (muskarininių receptorių agonistas)</i>
55		Kumarino pagrindu sudarytų rodenticidų fragmentas <i>Antikoaguliantas</i>
56		Difenadiono fragmentas <i>Antikoaguliantas</i>
57		Metileno fluorida dariniai <i>Krebso ciklo inhibicija, fluorocitrato kaupimasis organizme ir akonitazės inhibicija</i>
58	 Rⁿ – bent jau pirmajame sluoksnyje alifatinis ar aromatinis anglies atomas	Ketvirtinės amonio druskos <i>Makromolekulių alkilinimas</i>
59	 Rⁿ – bent jau pirmajame sluoksnyje alifatinis ar aromatinis anglies atomas	Aziridinio dariniai <i>Makromolekulių alkilinimas</i>

Nr.	Apibendrinta toksikoforo struktūra	Trumpas apibūdinimas
60	 R – bent jau pirmajame sluoksnyje alifatinis ar aromatinis anglies atomas	Piridinio dariniai <i>Makromolekulių alkilinimas</i>
61	 R – bent jau pirmajame sluoksnyje alifatinis anglies atomas	Metansulfonilhalogenido fragmentas
62		2-trifluormetil benzimidazolo fragmentas <i>Oksidacinio fosforilinio skyriklis</i>
63		2,4-dinitrofenolio fragmentas <i>Oksidacinio fosforilinio skyriklis</i>
64		3-nitrosalicilanilido fragmentas <i>Oksidacinio fosforilinio skyriklis</i>

PRIEDAS NR.2

Šiame priede pateikiamas statistinis ūmaus toksiškumo modeliavime panaudotų toksikoforų fragmentų įvertinimas. Čia Nr. – toksikoforo numeris iš Priedo Nr.1; N^+ – toksikoforo fragmentą turinčių junginių skaičius konkrečioje duomenų bazėje; $\tilde{x}(LD_{50}^+)$ – atitinkamoje sistemoje išmatuotų ūmaus toksiškumo verčių mediana toksikoforą turintiems junginiams. Palyginimui, analogiški parametrai pilniems disertacijoje analizuotiems junginių rinkiniams yra tokie:

pelė, IP – $N = 36031$, $\tilde{x}(LD_{50}) = 250$ mg/kg
 žiurkė, IP – $N = 5002$, $\tilde{x}(LD_{50}) = 230$ mg/kg
 pelė, OR – $N = 19571$, $\tilde{x}(LD_{50}) = 710$ mg/kg
 žiurkė, OR – $N = 8631$, $\tilde{x}(LD_{50}) = 850$ mg/kg
 pelė, IV – $N = 19963$, $\tilde{x}(LD_{50}) = 56$ mg/kg
 pelė, SC – $N = 8577$, $\tilde{x}(LD_{50}) = 290$ mg/kg

t – Stjudento t -testo reikšmė, apskaičiuojama tikrinant hipotezę, kad nagrinėjamų dviejų imčių (viso duomenų rinkinio ir dalies jo junginių, turinčių savo struktūroje toksikoforo fragmentą) ūmaus toksiškumo vidurkiai yra vienodi.

p – t -teste nagrinėjamos hipotezės pasitvirtinimo tikimybė, apskaičiuojama lyginant atitinkamą t reikšmę iš žemiau esančios lentelės su kritinėmis Stjudento t -skirstinio reikšmėmis. Kuo didesnė p reikšmė, tuo didesnė tikimybė, jog toksikoforą turinčių junginių išskyrimas į atskirą klasę nėra statistiškai reikšmingesnis už pradinio duomenų rinkinio atsitiktinį suskaidymą į dvi dalis ir atvirkščiai.

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x}(LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
1	pelė, IP	222	63	14.71	<0.0001
	žiurkė, IP	316	80	11.95	<0.0001
	pelė, OR	32	130	7.24	<0.0001
	žiurkė, OR	27	100	4.84	<0.0001
	pelė IV	32	49	1.92	0.0551
	pelė SC	28	20	7.46	<0.0001

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
2	pelė, IP	10	100	1.78	0.0751
	žiurkė, IP	3	35	1.84	0.0653
	pelė, OR	5	77	3.02	0.0025
	žiurkė, OR	7	780	0.4	0.6919
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	2	69	0.92	0.3579
3	pelė, IP	950	120	17.33	<0.0001
	žiurkė, IP	476	100	12.38	<0.0001
	pelė, OR	364	630	3.61	0.0003
	žiurkė, OR	375	290	6.23	<0.0001
	pelė IV	470	56	1.87	0.062
	pelė SC	213	100	7	<0.0001
4	pelė, IP	6	59	2.41	0.0161
	žiurkė, IP	1	170	0.08	0.9395
	pelė, OR	10	350	2.28	0.0227
	žiurkė, OR	17	350	2.01	0.0444
	pelė IV	20	56	0.47	0.635
	pelė SC	6	150	1.16	0.2458
5	pelė, IP	23	71	4.28	<0.0001
	žiurkė, IP	9	77	1.45	0.1481
	pelė, OR	9	360	1.01	0.3117
	žiurkė, OR	11	230	1.35	0.1785
	pelė IV	8	47	0.54	0.5879
	pelė SC	3	82	0.53	0.5966
6	pelė, IP	516	85	21.24	<0.0001
	žiurkė, IP	230	200	8.21	<0.0001
	pelė, OR	677	77	39.92	<0.0001
	žiurkė, OR	752	65	35.27	<0.0001
	pelė IV	257	56	6.45	<0.0001
	pelė SC	182	120	13.35	<0.0001
7	pelė, IP	18	2.9	12.03	<0.0001
	žiurkė, IP	7	4.9	5.95	<0.0001
	pelė, OR	5	22	6.14	<0.0001
	žiurkė, OR	10	7.9	6.26	<0.0001
	pelė IV	12	1.7	7.46	<0.0001
	pelė SC	9	10	5.35	<0.0001

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
8	pelė, IP	10	80	1.52	0.1277
	žiurkė, IP	6	5	5.36	<0.0001
	pelė, OR	78	94	14.61	<0.0001
	žiurkė, OR	142	25	18.49	<0.0001
	pelė IV	13	56	0.67	0.5035
	pelė SC	1	0.25	3.78	0.0002
9	pelė, IP	176	59	13.81	<0.0001
	žiurkė, IP	35	41	6.83	<0.0001
	pelė, OR	334	130	16.98	<0.0001
	žiurkė, OR	195	100	10.92	<0.0001
	pelė IV	186	34	12.48	<0.0001
	pelė SC	161	11	26.07	<0.0001
10	pelė, IP	39	26	7.46	<0.0001
	žiurkė, IP	8	81	1.53	0.1261
	pelė, OR	25	190	4.46	<0.0001
	žiurkė, OR	19	240	1.32	0.1866
	pelė IV	50	18	4.49	<0.0001
	pelė SC	16	72	2.93	0.0034
11	pelė, IP	33	19	9.72	<0.0001
	žiurkė, IP	3	180	-1.22	0.2221
	pelė, OR	16	87	5.23	<0.0001
	žiurkė, OR	30	260	2.86	0.0043
	pelė IV	16	39	1.53	0.1249
	pelė SC	2	240	-0.05	0.96
12	pelė, IP	7	50	3.59	0.0003
	žiurkė, IP	3	48	2.08	0.0375
	pelė, OR	5	150	2.14	0.032
	žiurkė, OR	7	180	2.05	0.0407
	pelė IV	74	56	1.32	0.1853
	pelė SC	1	75	0.61	0.5445
13	pelė, IP	4	25	3.42	0.0006
	žiurkė, IP	1	5	2.04	0.0411
	pelė, OR	2	74	2.2	0.0279
	žiurkė, OR	4	73	2.21	0.027
	pelė IV	8	56	0.25	0.8028
	pelė SC	0	-	-	-

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
14	pelė, IP	38	1.3	20.21	<0.0001
	žiurkė, IP	3	0.96	6.18	<0.0001
	pelė, OR	3	3.3	8.38	<0.0001
	žiurkė, OR	2	5.1	3.34	0.0008
	pelė IV	12	0.57	8.34	<0.0001
	pelė SC	0	-	-	-
15	pelė, IP	16	2.1	11.16	<0.0001
	žiurkė, IP	1	0.6	3.22	0.0013
	pelė, OR	1	1.4	4.43	<0.0001
	žiurkė, OR	3	16	2.79	0.0053
	pelė IV	1	15	0.85	0.3933
	pelė SC	0	-	-	-
16	pelė, IP	98	4.7	26.78	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	1	20	2.51	0.0122
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	0	-	-	-
17	pelė, IP	5	15	3.97	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	2	14	3.88	0.0001
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	4	6.3	2.9	0.0037
	pelė SC	2	10	2.43	0.0152
18	pelė, IP	36	2.6	15.45	<0.0001
	žiurkė, IP	1	0.006	5.78	<0.0001
	pelė, OR	3	3.4	5.99	<0.0001
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	7	3.5	5.69	<0.0001
	pelė SC	3	2.9	5.02	<0.0001
19	pelė, IP	2	11	2.87	0.0042
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	6	18	7.09	<0.0001
	žiurkė, OR	6	3.4	5.64	<0.0001
	pelė IV	12	2.8	8.96	<0.0001
	pelė SC	5	0.47	5.74	<0.0001

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
20	pelė, IP	27	9.2	10.09	<0.0001
	žiurkė, IP	2	5	2.89	0.0038
	pelė, OR	15	9.3	11.43	<0.0001
	žiurkė, OR	5	28	3.61	0.0003
	pelė IV	16	7.8	6.17	<0.0001
	pelė SC	15	9.4	7.25	<0.0001
21	pelė, IP	51	33	10.41	<0.0001
	žiurkė, IP	1	170	0.08	0.9395
	pelė, OR	5	25	5.18	<0.0001
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	18	50	1.14	0.255
	pelė SC	1	1.2	2.9	0.0037
22	pelė, IP	27	9.7	9.85	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	1	89	1.43	0.153
	žiurkė, OR	1	68	1.08	0.2819
	pelė IV	42	19	4.55	<0.0001
	pelė SC	1	53	0.79	0.4274
23	pelė, IP	5	7.5	6.28	<0.0001
	žiurkė, IP	2	15	2.01	0.0441
	pelė, OR	0	-	-	-
	žiurkė, OR	2	12	2.72	0.0065
	pelė IV	42	100	1.53	0.1251
	pelė SC	7	4.9	5.79	<0.0001
24	pelė, IP	18	55	5.48	<0.0001
	žiurkė, IP	4	1.1	5.05	<0.0001
	pelė, OR	2	130	1.66	0.0973
	žiurkė, OR	1	310	0.33	0.7392
	pelė IV	8	14	2.28	0.0226
	pelė SC	2	47	1.23	0.2205
25	pelė, IP	4	15	3.96	<0.0001
	žiurkė, IP	2	10	2.35	0.019
	pelė, OR	2	17	3.69	0.0002
	žiurkė, OR	1	2.3	2.75	0.0059
	pelė IV	2	2.2	2.96	0.0031
	pelė SC	32	23	8.1	<0.0001

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
26	pelė, IP	56	26	11.68	<0.0001
	žiurkė, IP	8	17	4.89	<0.0001
	pelė, OR	14	41	6.9	<0.0001
	žiurkė, OR	5	59	2.23	0.026
	pelė IV	33	16	4.89	<0.0001
	pelė SC	8	19	4.34	<0.0001
27	pelė, IP	2	0.0055	10.05	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	0	-	-	-
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	9	0.008	13.92	<0.0001
28	pelė, IP	8	1.3	9.44	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	0	-	-	-
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	0	-	-	-
29	pelė, IP	6	47	2.26	0.0239
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	3	91	1.94	0.0524
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	1	130	-0.56	0.5742
	pelė SC	0	-	-	-
30	pelė, IP	22	43	8.24	<0.0001
	žiurkė, IP	3	9.9	3.64	0.0003
	pelė, OR	12	30	8.3	<0.0001
	žiurkė, OR	2	10	2.83	0.0046
	pelė IV	28	22	5.81	<0.0001
	pelė SC	25	1.6	10.28	<0.0001
31	pelė, IP	4	36	2.54	0.0112
	žiurkė, IP	3	0.92	5.27	<0.0001
	pelė, OR	2	23	3.41	0.0007
	žiurkė, OR	3	2	5.51	<0.0001
	pelė IV	2	41	0.3	0.7669
	pelė SC	1	160	0.19	0.853

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
32	pelė, IP	2	0.0098	9.5	<0.0001
	žiurkė, IP	1	0.011	5.47	<0.0001
	pelė, OR	1	0.26	5.66	<0.0001
	žiurkė, OR	1	0.19	3.99	<0.0001
	pelė IV	1	0.0085	5.69	<0.0001
	pelė SC	1	0.013	5.43	<0.0001
33	pelė, IP	3	2.7	4.98	<0.0001
	žiurkė, IP	1	1.6	2.67	0.0075
	pelė, OR	3	2.8	6.69	<0.0001
	žiurkė, OR	2	390	0.3	0.7615
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	0	-	-	-
34	pelė, IP	22	20	7.72	<0.0001
	žiurkė, IP	1	15	1.43	0.1514
	pelė, OR	21	120	6.2	<0.0001
	žiurkė, OR	2	32	2.06	0.0396
	pelė IV	4	3.8	3.22	0.0013
	pelė SC	3	15	2.88	0.004
35	pelė, IP	15	1.3	13.37	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	0	-	-	-
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	1	0.15	4.07	<0.0001
36	pelė, IP	35	6	13.67	<0.0001
	žiurkė, IP	4	0.85	5.66	<0.0001
	pelė, OR	13	9	9.28	<0.0001
	žiurkė, OR	6	12	4.83	<0.0001
	pelė IV	11	4.2	4.37	<0.0001
	pelė SC	15	7.8	5.51	<0.0001
37	pelė, IP	1	0.3	4.42	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	0	-	-	-
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	4	1.2	5.76	<0.0001

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
38	pelė, IP	4	3.7	5.36	<0.0001
	žiurkė, IP	1	0.81	3.05	0.0023
	pelė, OR	1	55	1.77	0.076
	žiurkė, OR	1	28	1.52	0.1296
	pelė IV	4	0.9	4.44	<0.0001
	pelė SC	3	1.6	3.87	0.0001
39	pelė, IP	4	15	3.32	0.0009
	žiurkė, IP	1	0.36	3.5	0.0005
	pelė, OR	0	-	-	-
	žiurkė, OR	1	400	0.2	0.8426
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	1	6.8	1.94	0.0525
40	pelė, IP	6	3.7	5.85	<0.0001
	žiurkė, IP	1	2.5	2.43	0.0153
	pelė, OR	2	27	3.25	0.0012
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	4	1.2	4.92	<0.0001
	pelė SC	5	2.8	5.44	<0.0001
41	pelė, IP	3	0.69	7.86	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	7	14	8.45	<0.0001
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	8	0.57	8.67	<0.0001
	pelė SC	1	0.008	5.7	<0.0001
42	pelė, IP	36	100	4.16	<0.0001
	žiurkė, IP	5	130	0.61	0.541
	pelė, OR	25	400	1.36	0.1745
	žiurkė, OR	12	240	1.61	0.1065
	pelė IV	160	36	2.57	0.0101
	pelė SC	77	320	-0.66	0.5111
43	pelė, IP	18	70	3.6	0.0003
	žiurkė, IP	8	230	0.45	0.6491
	pelė, OR	11	210	2.41	0.0158
	žiurkė, OR	7	420	0.29	0.7723
	pelė IV	7	35	0.85	0.3967
	pelė SC	7	260	1.04	0.2996

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
44	pelė, IP	6	5.4	6.01	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	4	50	3.39	0.0007
	žiurkė, OR	1	19	1.72	0.0853
	pelė IV	2	0.5	4.32	<0.0001
	pelė SC	0	-	-	-
45	pelė, IP	3	4	4.75	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	1	1200	-0.46	0.647
	žiurkė, OR	1	75	1.03	0.3041
	pelė IV	1	1	2.6	0.0092
	pelė SC	0	-	-	-
46	pelė, IP	19	22	5.74	<0.0001
	žiurkė, IP	10	8	5.3	<0.0001
	pelė, OR	32	190	4.58	<0.0001
	žiurkė, OR	87	200	3	0.0027
	pelė IV	96	32	3.94	<0.0001
	pelė SC	2	95	0.67	0.5042
47	pelė, IP	118	16	18.74	<0.0001
	žiurkė, IP	7	75	1.28	0.2021
	pelė, OR	18	360	2.59	0.0095
	žiurkė, OR	18	510	1.67	0.0955
	pelė IV	41	56	-0.97	0.3318
	pelė SC	5	67	0.92	0.3581
48	pelė, IP	154	75	11.12	<0.0001
	žiurkė, IP	38	8.2	9.68	<0.0001
	pelė, OR	25	130	4.93	<0.0001
	žiurkė, OR	15	68	3.57	0.0004
	pelė IV	140	56	1.68	0.0921
	pelė SC	25	140	2.41	0.0161
49	pelė, IP	1	0.12	5.04	<0.0001
	žiurkė, IP	1	0.025	4.99	<0.0001
	pelė, OR	4	0.53	10.56	<0.0001
	žiurkė, OR	9	0.88	10.35	<0.0001
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	0	-	-	-

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
50	pelė, IP	32	33	9.89	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	0	-	-	-
	žiurkė, OR	2	44	1.83	0.0667
	pelė IV	5	180	-0.51	0.61
	pelė SC	1	7.5	1.89	0.0594
51	pelė, IP	107	140	4.25	<0.0001
	žiurkė, IP	11	120	0.36	0.7164
	pelė, OR	30	610	-0.33	0.742
	žiurkė, OR	30	460	1.67	0.0958
	pelė IV	26	59	-0.84	0.399
	pelė SC	9	190	0.24	0.818
52	pelė, IP	24	69	4.35	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	14	88	3.93	<0.0001
	žiurkė, OR	9	63	2.96	0.0031
	pelė IV	17	21	4.08	<0.0001
	pelė SC	30	95	3.37	0.0008
53	pelė, IP	13	4.6	5.98	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	2	170	1.33	0.1852
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	2	20	0.94	0.348
	pelė SC	0	-	-	-
54	pelė, IP	4	9.3	4.32	<0.0001
	žiurkė, IP	1	4.4	2.11	0.0346
	pelė, OR	1	11	2.92	0.0035
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	6	13	2.45	0.0144
	pelė SC	0	-	-	-
55	pelė, IP	0	-	-	-
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	5	0.8	10.64	<0.0001
	žiurkė, OR	5	0.49	8.2	<0.0001
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	0	-	-	-

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
56	pelė, IP	0	-	-	-
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	4	75	3.83	0.0001
	žiurkė, OR	2	1.8	4.08	<0.0001
	pelė IV	0	-	-	-
	pelė SC	0	-	-	-
57	pelė, IP	257	18	28.77	<0.0001
	žiurkė, IP	24	13	6.46	<0.0001
	pelė, OR	49	84	9.75	<0.0001
	žiurkė, OR	28	10	8.54	<0.0001
	pelė IV	22	53	-0.11	0.9102
	pelė SC	74	10	13.9	<0.0001
58	pelė, IP	1336	60	41.3	<0.0001
	žiurkė, IP	178	50	13.21	<0.0001
	pelė, OR	358	790	-1.27	0.2046
	žiurkė, OR	123	890	-1.02	0.309
	pelė IV	1639	10	54.66	<0.0001
	pelė SC	644	80	26.85	<0.0001
59	pelė, IP	8	7	6.58	<0.0001
	žiurkė, IP	1	34	0.99	0.3245
	pelė, OR	0	-	-	-
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	6	4.4	4.13	<0.0001
	pelė SC	3	4.7	3.88	0.0001
60	pelė, IP	267	77	16.39	<0.0001
	žiurkė, IP	29	110	2.43	0.0152
	pelė, OR	710	53	410	2.13
	žiurkė, OR	42	250	2.48	0.0133
	pelė IV	293	18	13.14	<0.0001
	pelė SC	63	83	5.23	<0.0001
61	pelė, IP	13	20	5.09	<0.0001
	žiurkė, IP	4	6.7	3.13	0.0018
	pelė, OR	3	200	2.32	0.0202
	žiurkė, OR	6	50	3.31	0.0009
	pelė IV	1	1	2.6	0.0092
	pelė SC	0	-	-	-

Nr.	Duomenų bazė	N^+	$\tilde{x} (LD_{50}^+)$, mg/kg	t	p
62	pelė, IP	10	24	4.65	<0.0001
	žiurkė, IP	1	170	0.1	0.9216
	pelė, OR	2	240	1.01	0.3122
	žiurkė, OR	129	13	21.75	<0.0001
	pelė IV	6	56	0.16	0.8726
	pelė SC	0	-	-	-
63	pelė, IP	6	25	3.25	0.0011
	žiurkė, IP	1	20	1.28	0.2021
	pelė, OR	8	45	5.08	<0.0001
	žiurkė, OR	8	43	3.32	0.0009
	pelė IV	5	180	-1.01	0.3134
	pelė SC	1	58	0.75	0.454
64	pelė, IP	12	15	5.76	<0.0001
	žiurkė, IP	0	-	-	-
	pelė, OR	0	-	-	-
	žiurkė, OR	0	-	-	-
	pelė IV	1	56	0	0.9983
	pelė SC	0	-	-	-