

【リスク評価（一次）評価 I での補足一覧表】

	ページ	章	項目	修正内容・理由
信頼性基準全体にかかる修正				
(1)	全体	4	単位換算式の追加	単位換算式として以下を追加。 ・圧力（化学工学便覧 改訂 6 版より） $1 \text{ Pa} = 1.00000\text{E-}5 \text{ bar} \rightarrow 1 \text{ bar} = 1.00000\text{E}5 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 9.86923\text{E-}6 \text{ atm} \rightarrow 1 \text{ atm} = 1.01325\text{E}5 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 1.01972\text{E-}5 \text{ at(= kgf/cm}^2) \rightarrow 1 \text{ at(= kgf/cm}^2) = 9.80665\text{E}4 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 1.45038\text{E-}4 \text{ psi(= lbf/in}^2) \rightarrow 1 \text{ psi(= lbf/in}^2) = 6.89476\text{E}3 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 10 \text{ dyn/cm}^2 \rightarrow 1 \text{ dyn/cm}^2 = 1.00000\text{E-}1 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 7.50062\text{E-}3 \text{ mmHg(= Torr) } \rightarrow 1 \text{ mmHg(= Torr) } = 1.33322\text{E}2 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 2.95300\text{E-}4 \text{ inHg} \rightarrow 1 \text{ inHg} = 3.3869\text{E}3 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 1.01972\text{E-}4 \text{ mH}_2\text{O} \rightarrow 1 \text{ mH}_2\text{O} = 9.80665\text{E}3 \text{ Pa}$ ・温度（化学工学便覧 改訂 6 版、理科年表机上版 平成 12 年より） $0 \text{ deg C} = 273.15\text{K} = 32 \text{ deg F}$ $-17.78 \text{ deg C} = 255.37\text{K} = 0 \text{ deg F}$ $\text{deg C} = 5/9 \times (\text{deg F} - 32)$ $\text{deg F} = 9/5 \times (\text{deg C} + 32)$
(2)	全体	4	補正式中の数字の変更	沸点の圧力補正式、蒸気圧の温度補正式及び水溶解度の温度補正式中の数字を以下のように変更。 ・273→273.15 ・101.3→101.325

(3)	全体	4	キースタディ選定ルールにおける不等号や約の扱い等の明確化	<p>不等号等のついたデータの扱いがあいまいであったため、これを以下の通り具体化。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 同じ信頼性ランクのデータで、不等号等がついていないデータがあれば、それを優先してキースタディ選定に採用する。 • 「約」がついている場合、「約」を外した数値をキースタディ選定に採用する。 • 同じ信頼性ランクのデータで、不等号がついたデータのみの場合、不等号を外した数値をキースタディ選定に採用する。
(4)	全体	4	平均値算出時の範囲外データの扱い	<p>平均値算出時に採用した全ての数値データが、算術平均の範囲から外れている場合、QSAR 結果をキースタディとして採用。</p>
(5)	全体	4	キースタディ選定ルールにおけるランク4のデータの扱い	<p>各エンドポイントの使用可否基準では、「信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータが無い場合に限り、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。」と記載している。しかしながら、信頼性ランク「4」のデータを使用する際、データが複数存在する場合の取扱い方について記載がないため、以下のように運用を明確化。</p> <ul style="list-style-type: none"> • ランク4の文献値があった場合、推計値は用いずにそれを使用（文献値が複数あった場合は平均値を使用）。 • 文献値がなかった場合、推計値を使用。
(6)	P.10	3.	Lange' s Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 2005 の利用	<p>「Lange' s Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 2005」は名称から物質を特定し情報の有無を確認することが必要。物質の同定が不可欠であるため、信頼性の定まった情報源の位置づけは変えないまま、データの精査が困難なりリスク評価（一次）の評価Ⅰの段階では、当該文献で取得されたデータは利用しないこととした。</p>

性状の項目別にかかる修正・見直し、各項目におけるルールの追加				
融点、沸点以外のエンドポイント（蒸気圧、水溶解度）				
(7)	全体	4	融点、沸点以外のエンドポイントにおいて範囲のあるデータが取得された場合の扱いの明確化	蒸気圧と水溶解度について、範囲のあるデータが取得された場合の扱いが明記されていなかったため、平均値を採用するよう扱いを明確化。
沸点				
(8)	P.12	4.2	沸点のキースタディ選定ルールの変更	信頼性の定まった情報源から、標準温度又は標準温度以外で測定した沸点の両方が得られる場合、標準温度で測定された沸点を優先してキースタディとして選定。信頼性の定まった情報源は1Aと2Bに分かれるが、両方の沸点が得られる場合において、かつ、1Aの沸点が標準温度で測定されておらず、2Bの沸点が標準温度で測定されている場合については2Bの沸点を優先してキースタディとして選定。
蒸気圧				
(9)	P.13	4.3	蒸気圧の使用可否基準とキースタディ選定ルールの変更	<ul style="list-style-type: none"> 温度記載がないデータについては信頼性ランクを「4」とした。 キースタディ選定ルールについて、同一信頼性ランクの中に複数データがある場合、測定温度が20～25℃に近いデータを優先。
ヘンリー係数				
(10)	P.15	4.6	推計値に係るキースタディ選定ルールの補足	キースタディ選定ルールの④において水溶解度の値によって推定方法を選択するようになっているが、水溶解度の信頼性ランクが2C以下の場合、水溶解度の値に係わらずHENRYWINで推計して採用（信頼性ランクは4）。HENRYWINで推計できない場合には、分子量、水溶解度、蒸気圧を用いた推計式で算出して採用（信頼性ランクは4）。

1-オクタノールと水との間の分配係数				
(11)	P.17	4.8	キースタディ選定ルールにおける範囲外のデータの扱い	現行のキースタディ選定ルールでは測定法に応じた数値の範囲が指定されているが、得られたデータがこの範囲外のデータしかない場合、その値を採用した。範囲内のデータと範囲外のデータの両方が得られた場合、範囲内のデータのみを用いてキースタディを選定。
生物濃縮性 (BCF)				
(12)	P.19		生物濃縮性のキースタディ選定ルールの②の修正	キースタディ選定ルール②の中に、キースタディ選定ルールの①にある、以下の内容を追加。 「その際に定常状態の値を優先する。利用可能な値が複数得られる場合は最も倍率の高いものを用いる。定常状態の値が得られない場合は、各濃度区における後半 3 回の算術平均濃縮倍率のうち最も倍率の高いものを用いる。「高濃縮性でない」ことが類推により判定されている場合はその類推物質の BCF を用いる。複数の物質から類推されている場合は最大値を用いる。」