

平成 23 年 9 月 15 日

## 化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について

### はじめに

化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律（以下「化審法」という。）の改正により、平成 22 年度に第二種監視化学物質及び第三種監視化学物質を対象に優先評価化学物質を指定するための評価（以下「スクリーニング評価」という。）を行い、平成 23 年度以降に一般化学物質及び新規化学物質を対象に優先評価化学物質を選定するためのスクリーニング評価を開始し、引き続きリスク評価を実施する予定となっている。

ここでは、このスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価 I（以下、「スクリーニング評価等」という。）で利用する物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データ（以下「性状データ」という。）について、信頼性の評価とスクリーニング評価等で用いるデータ（キースタディ）の選定ルールについて規定する。

対象となる性状データは、融点、沸点、蒸気圧、水に対する溶解度、1-オクタノールと水との間の分配係数、大気・水域・底質又は土壌に係る分配係数（有機炭素補正土壌吸着係数、ヘンリー係数<sup>1</sup>に限る。）、解離定数（酸解離定数に限る。）、生分解性、生物濃縮性に関するデータである。

これらの性状データの情報源は次の（ア）～（ウ）に大別される。

（ア）化審法上のデータ<sup>2</sup>

（イ）上記（ア）以外の文献情報等のデータ

（ウ）適用範囲の推定方法（2.2 参照）による定量的データ（（ア）、（イ）を除く。）

スクリーニング評価等に必要なこれらの性状データの信頼性評価とそれらの中からのキースタディの選定は、審査・判定と同等に行うことが理想的であるが、スクリーニング評価の一環として、多数の既存化学物質の性状データの信頼性評価やキースタディ選定を限られた時間内に効果的・効率的に審査・判定と同等に行うことは難しいと考えられる。そこで、円滑な信頼性評価やキースタディ選定等を行うことを目的とし、これらの性状データの信頼性を確認する基準（以下、「信頼性基準」という。）、信頼性を付与した性状データがスクリーニング評価等に利用できるかどうかの判断基準（以下、「使用可否基準」という。）

<sup>1</sup> ヘンリー係数：化学大辞典。ヘンリー定数、ヘンリー則定数と表現される場合もある。有害性情報の報告に関する省令（平成 16 年 3 月 18 日）に規定する蒸気圧及び水に対する溶解度より算出できる。

<sup>2</sup> 判定に用いられたデータ、国による試験データ、事業者より報告されたデータ

34 及びスクリーニング評価等に用いるキースタディを選定するルール（以下「キースタディ  
35 選定ルール」という。）（以下、この3つを併せ「選定基準」という。）をあらかじめ定め、  
36 その選定基準に従って(ア)～(ウ)の性状データの中からスクリーニング評価等に使用する  
37 性状データを選定することとする。また、優先評価化学物質の選定プロセスに科学的な客  
38 観性と透明性を持たせるために、性状の項目別に使用可否基準とキースタディ選定ルール  
39 を設定する。

40

## 41 1. 性状データに関する選定基準の考え方

### 42 1.1 信頼性ランクと使用可否基準

43 性状データの信頼性を、以下に示す、「信頼性あり（制限なし）（信頼性ランク1）」、「信  
44 頼性あり（制限付き）（信頼性ランク2）」、「信頼性なし（信頼性ランク3）」、「評価不能（信  
45 頼性ランク4）」の4つの信頼性ランクに分類する。

46 この信頼性ランクは、「OECD-HPV 化学物質点検マニュアル」での信頼性の考え方（参考  
47 1）、「Japan チャレンジスポンサーマニュアル<sup>3</sup>」での信頼性ランク分類の目安（参考2）  
48 を参考に整理したものであり、

49 (1) 国際的に、もしくは化審法上認められた試験法（推計法を含む）等によるデータであ  
50 るか

51 (2) 専門家によりレビューされている、もしくはレビューされているとみなすことができ  
52 るデータであるか

53 の2つの観点から分類している（表1）。

54

55 スクリーニング評価等には、信頼性ランクが付与された性状データのうち、信頼性ラン  
56 ク「1」又は信頼性ランク「2」に該当する性状データを原則使用するものとする。

57 信頼性ランク「3」に該当する性状データは、使用しない。

58 信頼性ランク「4」に該当する性状データは、原則使用しない。

59 なお、信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ラン  
60 ク「4」に該当する性状データを暫定的に使用することがある。

61

62 （参考）信頼性ランク「4」に該当する性状データを、リスク評価（一次）評価Ⅱ以降に  
63 使用する場合には、精査等を行うこととする。

64

65 なお、ランクのより上位に該当するデータであっても、試験条件や結果の有効性が必ず  
66 しも担保されていない場合もあり得る。性状データ選定に係る全体の流れ（図2）の中で  
67 こうしたデータが確認された場合は使用しないと判断することもある。性状データごとの  
68 使用可否基準については、「4. 性状の項目別の使用可否基準とキースタディ選定ルール」

<sup>3</sup> 既存化学物質安全性情報収集・発信プログラムスポンサーマニュアル（詳細版）

69 の「使用可否基準」を参照。

70

71 【信頼性ランク 1（信頼性あり（制限なし））】

72 ・化審法通知<sup>4</sup>の試験法、OECD テストガイドライン（2.1 参照）及びそれに準じた試験  
73 法（参考3）によるもので GLP 準拠のもの（信頼性ランク 1 A）。

74 ・化審法の判定結果を導くために直接的に使われたデータ及び OECD-HPV プログラムの  
75 SIAR（SIDS Initial Assessment Report）で使用されたデータ（キースタディがあるものは  
76 そのデータ、Reliability の記載があるものは信頼性ランク 1 及び 2 のデータを採用す  
77 る。）（信頼性ランク 1 A）。

78 ・化審法通知の試験法、OECD テストガイドライン（2.1 参照）及びそれに準じた試験  
79 法（参考3）によるもので GLP 準拠でないもの、または不明なもの（信頼性ランク 1 B）。

80 ・生分解性については、上記によらず、「4.9 生分解性」の使用可否基準を参照のこと。

81

82 【信頼性ランク 2（信頼性あり（制限付き））】

83 ・OECD テストガイドライン（2.1 参照）及びそれに準じた試験法（参考3）と完全に  
84 一致していないが、専門家により科学的に受け入れられると判断された試験法による  
85 データ（信頼性ランク 2 A）。

86 ・「信頼性が高いと認められる情報源」（3 参照）に収録されている測定値データ（信頼  
87 性ランク 2 B）。

88 ・適用範囲の推定方法（2.2 参照）による推定値（信頼性ランク 2 C）。

89

90 【信頼性ランク 3（信頼性なし）】

91 ・試験等に障害または不適切な箇所があり、専門家により容認できないと判断されたデ  
92 ータ。

93

94 【信頼性ランク 4（評価不能）】

95 ・試験法及び情報源が不明なデータ。

96 ・試験法等の詳細が不明で、信頼性ランク 2 A か 3 かの判断ができないデータ。

97

98

99

---

<sup>4</sup> 新規化学物質等の試験の方法について（平成 23 年 3 月 31 日薬食発 0331 第 7 号、平成 23・03・29 製局第 5 号、環企発第 110331009 号）

表1 信頼性ランクと使用可否基準

使用可否基準	信頼性ランク		信頼性を評価する観点		
			国際的に、もしくは化審法上認められた試験法等によるデータ	専門家によりレビューされているとみなすことができるデータ	
原則使用可	信頼性あり	1A	制限なし	化審法又は OECD テストガイドライン (2.1 参照) 及びそれに準じた試験法 (参考3) によるもので GLP 準拠のもの。	化審法の判定結果を導くために直接的に使われたデータ及び OECD / HPV プログラムの SIAR (SIDS Initial Assessment Report) で使用されたデータ (キースタディがあるものはそのデータ、Reliability の記載があるものは信頼性ランク 1 及び 2 のデータ) (ただし、分解性以外のデータ)
		1B		化審法又は OECD テストガイドライン (2.1 参照) 及びそれに準じた試験法 (参考3) によるもので GLP 準拠でないもの又は、不明なもの。	—
		2A	制限付き	—	OECD テストガイドライン (2.1 参照) 及びそれに準じた試験法 (参考3) に準拠していないが、専門家により科学的に受け入れられると判断された試験法によるデータ。
		2B		—	「信頼性の定まった情報源」(3 参照) に収録されている測定値データ。
		2C		適用範囲の推定方法 (2.2 参照) による推定値。	専門家が判断したカテゴリーアプローチによる推定値。
使用不可	信頼性なし	3	—	試験等に障害又は不適切な箇所があり、専門家により容認できないと判断されたデータ。	
原則使用不可	評価不能	4	試験法及び情報源が不明なデータ、又は試験法等の詳細が不明でランク 2 A か 3 かの判断を行うことができないデータ。		

101

## 102 1.2 キースタディ選定ルール

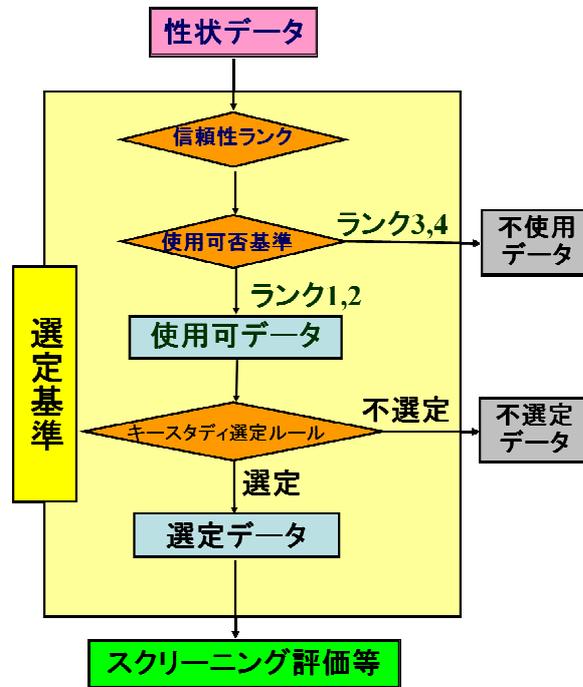
103 スクリーニング評価等に使用する性状データは、信頼性ランク「1」又は「2」に該当  
 104 するものの中から信頼性ランクの高いものから優先的に選択する (信頼性ランクの高いも  
 105 の: 1A>1B>2A>2B>2C)。最も高い信頼性ランクにデータが複数ある場合は、性状デー  
 106 タごとに設定するキースタディ選定ルールによって決定する<sup>5</sup> (「4. 性状の項目別の使用可  
 107 否基準とキースタディ選定ルール」の「キースタディ選択ルール」を参照)。

108

109 選定基準を使用してキースタディを選定する概念図は図1のとおり。詳細なフロー図に

<sup>5</sup> 測定値が得られず、かつ、推定方法も適用できない場合の扱いについては、別途、化審法におけるリスク評価のガイダンスにおいて定める。

110 ついては「5. スクリーニング評価・リスク評価における性状データ選定の全体像」を参照  
 111 のこと。また、リスク評価（一次）評価Ⅰ終了以降では、専門家による総合的な観点から  
 112 性状データについて精査を行った上で、精査を踏まえて必要に応じてキースタディの見直  
 113 しを行う。



114

115

116

117

118

図1 物性データに関する概念的選定基準

119

## 2. 国際的に、もしくは化審法上認められた試験法等

120

### 2.1 試験法

121

化審法試験法通知の試験法、以下に示す OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法に従って測定された試験データは信頼性ランク「1」のデータと判断する。

122

123

OECD 等におけるテストガイドラインの改廃等に応じて適宜見直すこととする。

124

125

#### (1) 融点

126

① OECD TG 102 (Melting Point/ Melting Rang)

127

② JIS K 0064 (化学製品の融点及び溶融範囲測定方法)

128

③ JIS K 0065 (化学製品の凝固点測定方法)

129

④ ISO 1392 (Method for the determination of the crystallizing point)

130

⑤ ISO 2207 (Petroleum waxes - Determination of congealing point)

131

⑥ ISO 3016 (Petroleum oils - Determination of pour point)

- 132 ⑦ EPA OPPTS 830.7200 (Melting Point / Melting Range)  
133  
134 (2) 沸点  
135 ① OECD TG 103 (Boiling point/boiling range)  
136 ② JIS K 0066 (化学製品の蒸留試験方法)  
137 ③ ISO 918 (Volatile organic liquids for industrial use – Determination of distillation  
138 characteristics)  
139 ④ ISO 3924 (Petroleum products – Determination of boiling range distribution – Gas  
140 chromatography method)  
141 ⑤ ISO 3405:1988 (Petroleum products – Determination of distillation characteristics)  
142 ⑥ EPA OPPTS 830.7220 (Boiling Point / Boiling Range)  
143  
144 (3) 蒸気圧  
145 ① OECD TG 104 (Vapour Pressure Curve)  
146 ② JIS K 2258-1 (原油及び石油製品－蒸気圧の求め方－第1部：リード法)  
147 ③ JIS K 2258-2 (原油及び石油製品－蒸気圧の求め方－第2部：3回膨張法)  
148 ④ ISO 3007 (Petroleum products and crude petroleum – Determination of vapor pressure –  
149 Reid method)  
150 ⑤ EPA OPPTS 830.7950 (Vapor Pressure)  
151  
152 (4) 水に対する溶解度  
153 ① OECD TG 105 (Water Solubility)  
154 ② EPA OPPTS 830.7840 (Water Solubility)  
155 ③ EPA OPPTS 830.7860 (Water Solubility Generator Column Method)  
156  
157 (5) 有機炭素補正土壌吸着係数  
158 ① OECD TG 121 (Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on Sewage  
159 Sludge using High Performance Liquid Chromatography (HPLC))  
160 ② OECD TG 106 (Adsorption -Desorption Using a Batch Equilibrium Method)  
161 ③ EPA OPPTS 835.1110 (Activated Sludge Sorption Isotherm)  
162 ④ EPA OPPTS 835.1220 (Sediment and Soil Adsorption / Desorption Isotherm)  
163 ⑤ ISO 18747 (Water quality: adsorption of substances on activated sludge-batch test using  
164 specific analytical method.)  
165  
166 (6) 解離定数 (酸解離定数)  
167 OECD TG 112 (Dissociation Constants in Water)

168

169 (7) 1-オクタノールと水との間の分配係数

170 ① OECD TG 107 (Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method)

171 ② OECD TG 117 (Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid  
172 Chromatography (HPLC) Method)

173 ③ OECD TG 123 (Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method)

174 ④ JIS Z 7260-107 (分配係数 (1-オクタノール/水) の測定—フラスコ振とう法)

175 ⑤ JIS Z 7260-117 (分配係数 (1-オクタノール/水) の測定—高速液体クロマトグラフィー)

176 ⑥ EPA OPPTS 830.7550 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Shake Flask Method)

177 ⑦ EPA OPPTS 830.7560 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Generator Column Method)

178 ⑧ EPA OPPTS 830.7570 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Estimation By Liquid  
179 Chromatography)

180

181 (8) 生分解性

182 ① OECD TG 301A (DOC Die-Away)

183 ② OECD TG 301 B (CO<sub>2</sub> Evolution (Modified Sturm Test))

184 ③ OECD TG 301C (MITI (I) (Ministry of International Trade and Industry, Japan))

185 ④ OECD TG 301D (Closed Bottle)

186 ⑤ OECD TG 301E (Modified OECD Screening)

187 ⑥ OECD TG 301F (Manometric Respirometry)

188 ⑦ OECD TG 310 (Ready Biodegradability – CO<sub>2</sub> in sealed vessels (Headspace Test))

189

190 (9) 生物濃縮性<sup>6</sup>

191 ① OECD TG 305 (Bioconcentration: Flow-through Fish Test)

192 ② OECD TG 305 A (Bioaccumulation: Sequential Static Fish Test)

193 ③ OECD TG 305 B (Bioaccumulation: Semi-static Fish Test)

194 ④ OECD TG 305 C (Bioaccumulation: Test for the Degree of Bioconcentration in Fish)

195 ⑤ OECD TG 305 D (Bioaccumulation: Static Fish Test)

196 ⑥ OECD TG 305 E (Bioaccumulation: Flow-through Fish Test)

197 ⑦ JIS Z 7260-305 (生物濃縮 (水からの直接濃縮) : 魚類を用いる連続流水式試験方法)

198 ⑧ EPA OPPTS 850.1730 (Fish Bioconcentration Test)

199

200 2.2 推定方法

201 「OECD-HPV 化学物質点検マニュアル」において、SIDS 項目に対して推定値の使用を認  
202 めており、本選定基準においても、適用範囲の推定方法による推定値を、信頼性ランク「2

---

<sup>6</sup> OECD TG 305 A～E は、1996 年に OECD TG 305 に統合された。

203 C」のデータ（入力データが信頼性ランク「2B」以上の場合に限る。）として補完すること  
 204 とする。なお、推定するために用いたデータが、信頼性ランク「2C」以下の場合、得られ  
 205 る推定値は、信頼性ランク「4」（信頼性不明）とする<sup>7</sup>。

206 スクリーニング評価等において性状データの補完に用いる推定方法及び適用範囲を表2  
 207 に示す。

208

209

表2 スクリーニング評価等においてデータ補完に用いる推定方法

項目	推定方法	推定に必要な項目	適用範囲
融点	MPBPWIN (EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号	無機・金属・有機金属化合物、分子量が1000を超える物質、反応性・加水分解性物質、1・2 族の陽イオン塩化合物以外の物質 <sup>7</sup>
沸点	MPBPWIN (EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号	
蒸気圧	MPBPWIN (EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号、融点、沸点	
水に対する溶解度	WSKOWWIN (EPI Suite) <sup>※1</sup>	SMILES 又は CAS 番号、Log Pow、融点、MW	
有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)	KOCWIN (EPI Suite) <sup>※2</sup>	SMILES 又は CAS 番号、Log Pow	
1-オクタノールと水との間の分配係数 (log Pow)	KOWWIN (EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号	
生物濃縮係数 (BCF)	BCFBAFWIN (EPI Suite) <sup>※3</sup>	SMILES 又は CAS 番号、Log Pow	同上、4.10 参照
	濃縮性予測システム(CERIモデル) <sup>※4</sup>	SMILES 又は CAS 番号、Log Pow	有機物質一般全般。ただし、logPow が7以上の物質、珪素化合物、フッ素化合物、アミノ酸、糖類及び金属化合物は適用外
	BCF base-line model(OASIS Catalogic) <sup>※5</sup>	SMILES 又は CAS 番号	有機化合物全般（無機化合物や高分子化合物を除く）。但し、以下の3種類のドメインの領域内の物質が精度良く予測できる物質とされている。 ①パラメータドメイン：logPow、分子量、対水溶解度がトレーニングセットの範囲内。 ②構造ドメイン：トレーニングセットに含まれている部分構造のみから成る化学構造を持つ物質。 ③メカニズムドメイン：受動拡散が仮定できる物質。
	回帰式 (4.10 参照)	Log Pow	4.10 参照

<sup>7</sup> ただし、推定方法において入力値に推計値を前提としている場合は「2C」とする。具体的には4.10の(式2)の場合。

ヘンリー係数	HENRYWIN (EPI Suite) ※6	SMILES 又は CAS 番号	水に対する溶解度 $\geq 1$ mol/L (4.6 参照) ※8
	計算式 $H=VP/(WS/MW)$	分子量、水に対する溶解度、蒸気圧	水に対する溶解度 $< 1$ mol/L (4.6 参照)
解離定数 (酸解離定数) (pKa)	SPARC	SMILES	有機化合物 ※9

- 210 ※1: トレーニングセットの適用範囲: 分子量 (MW) = 27~628、Log Pow=-3.9~8.3  
211 ※2: トレーニングセットの適用範囲: 分子量 (MW) = 32~665、Log Koc=約 0~約 7  
212 ※3: トレーニングセットの適用範囲: 分子量 (MW) = 68~959、Log Pow=-1.4~11.3  
213 ※4: トレーニングセットの適用範囲: 記載なし  
214 ※5: トレーニングセットの適用範囲: 分子量 (MW) = MW=16.0416~943.2202、logPow=-4.0484~16.0739  
215 ※6: トレーニングセットの適用範囲: 分子量 (MW) = 26~451  
216 ※7: OECD のサイト (<http://webdominol.oecd.org/comnet/env/models.nsf>; 2009年6月6日アクセス) から引用 (2011年3月3日現在不通)  
217  
218 ※8: トレーニングセットに含まれる結合を持つ化合物のみ推定値が出力される  
219 ※9: EPAのサイト ([http://www.epa.gov/athens/publications/reports/EPA\\_600\\_R\\_03\\_033.pdf](http://www.epa.gov/athens/publications/reports/EPA_600_R_03_033.pdf); 2011年3月3日アクセス)から引用、トレーニングセットの適用範囲: pKa=約-12~約18  
220  
221  
222

223 Estimation Program Interface (EPI) Suite は、米国環境保護庁 (以下、「U.S. EPA」という。)と Syracuse Research Corporation が共同開発した物理化学的性状と環境中運命評価モデルに関するソフトウェアであり、融点、沸点、蒸気圧などの各項目に関する構造活性相関等による推計モデルの集合体である。SMILES 形式の構造式又は CAS 番号を入力することによって、推定値を計算する。

228 SPARC は、SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry のことで、米国ジョージア大学の L.A. Carreira 教授らがインターネット上に構築している化学構造-物性計算ソフトウェアであり、pKa などの物理化学的性状を推算する機能を備えている。KOWWIN や ClogP が置換基の寄与率を加算して特性値を算出するのに対し、SPARC は基本的な化学構造のアルゴリズム (科学的な熱力学原理にもとづいたメカニズムモデル) を基盤とする一般的な方法である。なお、SPARC では SMILES を用いて構造情報を入力する必要がある。

234

### 235 3. 信頼性の定まった情報源

236 本選定基準では、3.1 から 3.3 に掲げる情報源を信頼性の定まった情報源として扱う。信頼性の定まった情報源は、必要に応じ柔軟に見直しを行う。

238

#### 239 3.1 信頼性が高いと認められる情報源

240 「Japan チャレンジスポンサーマニユアル」での信頼性ランク分類の目安 (参考2) において、信頼性が高いと認められる情報源に収録されているデータの使用を認めている。本

242 選定基準においても、「Japan チャレンジスポンサーマニュアル」、「OECD- HPV 化学物質  
243 点検マニュアル」、「REACH の技術ガイダンス」に取り上げられており、ピアレビューがな  
244 されていると考えられる次の情報源の測定値データについては、原則として原著等での確  
245 認を要さず<sup>8</sup>信頼性ありと判断する。

246 以下に掲げる情報源のうち、OECD の SIDS (Screening Information Data Set) において SIAR  
247 に使用されたデータは信頼性ランク「1 A」に分類される。その他の情報源は、表 1 に示  
248 す基準では、信頼性ランク「2 B」と判断されるが、2.1 に記載した試験法にて実施された  
249 ことが確認できれば、原則信頼性ランク「1」に分類される。

250

- 251 ・ OECD : SIDS レポート
- 252 ・ CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th, CRC-Press, 2009
- 253 ・ Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
- 254 ・ Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
- 255 ・ SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
- 256 ・ The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
- 257 ・ The IUPAC Solubility Data Series
- 258 ・ Illustrated Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic  
259 Chemicals, CRC-Press, 1997
- 260 ・ Lange's Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 2005

261

### 262 3.2 専門家によるレビューを経ている情報源

263 原則として、次の情報源の測定値データ（キースタディがあるものはそのデータ、  
264 Reliability の記載があるものは信頼性ランク「1」及び「2」のデータ）については、専門  
265 家によるレビューを経ている等の作成経緯を考慮して原著等での確認を要さず原則として  
266 信頼性ありと判断する。

267 表 1 に示す基準では、信頼性ランク「2 B」と判断されが、2.1 に記載した試験法にて実  
268 施されたことが確認できれば、原則信頼性ランク「1」に分類される。

269 キースタディ、Reliability 1 又は Reliability 2 のデータが 2 つ以上ある場合は、優先順位は  
270 キースタディ > Reliability 1 > Reliability 2 とする。

271

- 272 ・ US/HPV チャレンジプログラム
- 273 ・ Japan チャレンジプログラム
- 274 ・ (独)製品評価技術基盤機構：「化学物質の初期リスク評価書」・ (財)化学物質評価研究機  
275 構・ (独)製品評価技術基盤機構：「化学物質有害性評価書」

---

<sup>8</sup> 「OECD-HPV マニュアル」や「REACH の技術ガイダンス」では、HSDB 及び SRC PhysProp Database については、原著等での確認を要するとの記載がある。

- 276 ・ 環境省環境リスク評価室：「化学物質の環境リスク評価」
- 277 ・ WHO/IPCS：「環境保健クライテリア（EHC）」
- 278 ・ WHO/IPCS：「国際簡潔評価文書（CICAD）」
- 279 ・ ATSDR（米国毒性物質疾病登録局）：「Toxicological Profile」
- 280 ・ EU ECB（European Chemicals Bureau）：「リスク評価書（EU Risk Assessment Report）」

281

282 （参考）これらの情報源から得られた性状データを、リスク評価（一次）評価Ⅱ以降に使用  
283 する場合には、精査等を行うこととする。

284

### 285 3.3 専門家が信頼性ありと認めた情報源

286 専門家が信頼性ありと認めた次の情報源の測定値データについては原著等での確認を要  
287 さず信頼性ありと判断する。

288 表1の基準では、信頼性ランク「2B」と判断される。

289

- 290 ・ Sigma-Aldrich 試薬カタログ

291

292 （参考）この情報源から得られた性状データを、リスク評価（一次）評価Ⅱ以降に使用す  
293 る場合には、精査等を行うこととする。

294

## 295 4. 性状の項目別の使用可否基準とキースタディ選定ルール

### 296 4.1 融点

#### 297 使用可否基準

298 表1の信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択する。

299 融点のデータが得られない場合、凝固点のデータを選択することができる。この場合、  
300 その旨を明示する。得られたデータが溶融範囲又は凝固範囲である場合は、その範囲の平  
301 均値を融点又は凝固点として扱う。

302 なお、融点又は凝固点を得られない場合であっても、軟化点/流動点、分解点、及び昇華  
303 点を得られる場合には、専門家判断により代替することができる。この場合、その旨を明  
304 示する。

305 信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ランク「4」  
306 のデータを暫定的に使用する。

307

#### 308 キースタディ選定ルール

309 使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選択する。

310 ① 信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も信頼性が高いデータが1つであれば、  
311 それを採用する。

- 312 ② 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合は、その算術平均値を求め、算  
313 術平均値の算出に用いた各データが算術平均値±10°C以内<sup>9</sup>である場合は算術平均値に  
314 最も近い測定値を選定する。算術平均値±10°Cを超えるデータがある場合は、そのデ  
315 ータを除いた残りのデータの算術平均値を求め、その値に最も近い測定値を選定する。  
316 なお、データが2つの場合においてはキースタディを1つに絞り込むことはできない。  
317 この場合には、2つのデータをキースタディとし、化学物質の融点としては2つのデ  
318 ータの算術平均値を採用する。
- 319 ③ 信頼性ランク「2」に該当するデータが複数ある場合は、②と同様に選定する。
- 320 ④ MPBPWIN (EPI Suite) による融点の推定値を選定する。

321

## 322 4.2 沸点

### 323 使用可否基準

- 324 表1の信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択する。
- 325 得られたデータが沸点範囲である場合は、その範囲の平均値を沸点として扱う。
- 326 信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ランク「4」  
327 のデータを暫定的に使用する。

328

### 329 キースタディ選定ルール

- 330 使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選定する。
- 331 得られた沸点データが標準圧力以外の場合には、次に示す式で圧力補正を行い、標準圧  
332 力 (101.3 kPa) における値に換算する<sup>10</sup>。

$$BP' = BP + 0.00090 \times (273 + BP) \times \left(101.3 - \frac{P}{1000}\right)$$

333

- 334 ① 信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も信頼性が高いデータが1つであれば、  
335 それを採用する。
- 336 ② 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合、圧力記載のデータを優先し、  
337 以下のように選定する。
- 338 a. 圧力記載のデータが1つである場合：当該データを採用する。
- 339 b. 圧力記載のデータが複数ある場合：その算術平均値を求め、算術平均値の算出に  
340 用いた各データが算術平均値±12.5°C以内<sup>11</sup>である場合は算術平均値に最も近い  
341 測定値を選定する。(算術平均値±12.5°Cを超えるデータがある場合は、そのデー  
342 タを除いた残りのデータの算術平均値を求め、その値に最も近い測定値を選定す

<sup>9</sup> REACH の技術ガイダンスでの測定値の推定精度±2.0K を参考に設定。

<sup>10</sup> JIS K0066 化学製品の蒸留試験方法 5.3 留出温度の大気圧補正式から引用、BP は補正前沸点 (°C)、BP' は補正後沸点 (°C)、P は圧力 (Pa)。

<sup>11</sup> REACH の技術ガイダンスでの測定値の推定精度±2.5K を参考に設定。

343 る。なお、データが2つの場合においてはキースタディを1つに絞り込むことは  
344 できない。この場合には、2つのデータをキースタディとし、化学物質の沸点とし  
345 ては2つのデータの算術平均値を採用する。

346 c. 圧力記載のないデータが複数ある場合：bと同様に選定する。

347 ③ 信頼性ランク「2」に該当するデータが複数ある場合は、②と同様に選定する。

348 ④ MPBPWIN (EPI Suite) による沸点の推定値を選定する。

349

### 350 4.3 蒸気圧

#### 351 使用可否基準

352 表1の信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択する。

353 信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ランク「4」  
354 のデータを暫定的に使用する。

355

#### 356 キースタディ選定ルール

357 使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選定する。

358 温度記載のある蒸気圧は、20°Cにおける値に換算する。温度補正は次に示す式を用いる<sup>12</sup>。

$$VP' = VP \times e^{\left\{ \frac{H_{0\text{vapor}}}{R} \times \left( \frac{1}{T+273} - \frac{1}{20+273} \right) \right\}}$$

359

360

361 ① 信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も信頼性が高いデータが1つであれば、  
362 それを採用する。

363 ② 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合、20~25°Cにおけるデータを優  
364 先し、以下のように選定する。

365 a. 20~25°Cにおけるデータが1つである場合：当該データを採用する。

366 b. 20~25°Cにおけるデータが複数ある場合：その算術平均値を求め、算術平均値の  
367 算出に用いた各データが算術平均値±50%以内<sup>13</sup>である場合は算術平均値に最も近  
368 い測定値を選定する。算術平均値±50%を超えるデータがある場合は、そのデータ  
369 を除いた残りのデータの算術平均値を求め、その値に最も近い測定値を選定する。  
370 なお、データが2つの場合においてはキースタディを1つに絞り込むことはでき  
371 ない。この場合には、2つのデータをキースタディとし、化学物質の蒸気圧として  
372 は2つのデータの算術平均値を採用する。

<sup>12</sup> ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part C, Chapter 3, 2.3.2 Data for exposure models の Equation (2)から引用、VP は補正前蒸気圧 (Pa)、VP' は補正後蒸気圧 (Pa)、T は温度 (K)、R は気体定数 (8.314 Pa・m<sup>3</sup>/(mol・K))、H<sub>0vapor</sub> は蒸発エンタルピー (5×10<sup>4</sup>J/mol)。

<sup>13</sup> REACH の技術ガイダンスでの測定値の再現精度が最大 50%であることに基づき設定。

- 373 c. 20～25℃以外のデータが複数ある場合：20～25℃に温度に近いデータを採用する。  
 374 d. 温度記載のないデータが複数ある場合：bと同様に選定する。  
 375 ③ 信頼性ランク「2」に該当するデータが複数ある場合は、②と同様に選定する。  
 376 ④ MPBPWIN (EPI Suite) による蒸気圧の推定値を選定する。このとき、キースタディ選定  
 377 ルールに基づき決定された融点と沸点の値（測定値）を用いる。

$$VP' = VP \times e^{\left\{ \frac{H_{0\text{vapor}}}{R} \times \left( \frac{1}{T+273} - \frac{1}{20+273} \right) \right\}}$$

378

#### 379 4.4 水に対する溶解度

##### 380 使用可否基準

- 381 表1の信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択する。  
 382 信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ランク「4」  
 383 のデータを暫定的に使用する。

384

##### 385 キースタディ選定ルール

- 386 使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選定する。  
 387 温度記載のある値は20℃の値に換算する。温度補正は次に示す式で行う<sup>14</sup>。

$$WS' = WS \times e^{\left\{ \frac{H_{0\text{solut}}}{R} \times \left( \frac{1}{T+273} - \frac{1}{20+273} \right) \right\}}$$

388

- 389 「不溶」等の定性的データの定量的データへの変換は行わないが、「不溶」と記載されて  
 390 いるデータしか得られない場合は、測定方法の検出限界値の記載がある場合に限り、検出  
 391 限界値を水に対する溶解度として選定する。この場合、その旨を明示する。

392

- 393 ① 信頼性ランク「1」又は「2」で最も信頼性が高いデータが1つであれば、それを採  
 394 用する。  
 395 ② 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合は、20～25℃における値を優先  
 396 し、以下のように選定する。  
 397 a. 20～25℃におけるデータが1つである場合：当該データを採用する。  
 398 b. 20～25℃におけるデータが複数ある場合：その算術平均値を求め、算術平均値の  
 399 算出に用いた各データが算術平均値±30%以内<sup>15</sup>である場合は算術平均値に最も近  
 400 い測定値を選定する。算術平均値±30%を超えるデータがある場合は、そのデータ

<sup>14</sup> ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part II, Chapter 3, 2.3.2 Data for exposure models の式(3)から引用、WSは補正前水溶解度 (mg/L)、WS'は補正後水溶解度 (mg/L)、Tは温度 (K)、Rは気体定数=8.314 [Pa・m<sup>3</sup>/(mol・K)]、H<sub>0solut</sub>は溶解エンタルピー=1×10<sup>4</sup> (J/mol)。

<sup>15</sup> REACHの技術ガイダンスでの測定値の併行精度が最大30%であることに基づき設定。

- 401 を除いた残りのデータの算術平均値を求め、その値に最も近い測定値を選定する。  
402 なお、データが2つの場合においてはキースタディを1つに絞り込むことはでき  
403 ない。この場合には、2つのデータをキースタディとし、化学物質の水に対する溶  
404 解度としては2つのデータの算術平均値を採用する。
- 405 c. 20～25 以外のデータが複数ある場合： 20～25 に温度に近いデータを採用する。  
406 d. 温度記載のないデータが複数ある場合： bと同様に選定する。
- 407 ③ 信頼性ランク「2」のデータが複数ある場合、②と同様に選定する。  
408 ④ WSKOWWIN (EPI Suite) による水に対する溶解度の推定値を選定する。このとき、キ  
409 スタディ選定ルールに基づき決定された log Pow 及び融点の値 (測定値) を用いる。

410

#### 411 4.5 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)

##### 412 使用可否基準

- 413 表1の信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択する。  
414 信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ランク「4」  
415 のデータを暫定的に使用する。

416

##### 417 キースタディ選定ルール

- 418 使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選定する。
- 419 ① 信頼性ランク「1」に該当するデータが1つであれば、それを採用する。  
420 ② 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合は、その算術平均値を求め、そ  
421 の値に最も近い測定値を選定する。なお、データが2つの場合においてはキースタ  
422 ディを1つに絞り込むことはできない。この場合には、2つのデータをキースタディとし、  
423 化学物質の Koc としては2つのデータの算術平均値を採用する。
- 424 ③ 信頼性ランク「2」に該当するデータが複数ある場合は、②と同様に選定する。  
425 ④ KOCWIN (EPI Suite) による Koc の推定値を選定する。このとき、キースタディ選  
426 定ルールに基づき決定された log Pow の値 (ただし測定値に限る。すなわち「2C」のデータ  
427 を除く。) を用いる。

428

#### 429 4.6 ヘンリー定数

##### 430 使用可否基準

- 431 表1の信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択する。  
432 信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ランク「4」  
433 のデータを暫定的に使用する。

434

##### 435 キースタディ選定ルール

- 436 使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選定する。

- 437 ① 信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も信頼性が高いデータが1つであれば、  
438 それを選定する。
- 439 ② 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合は、その算術平均値を求め、そ  
440 の値に最も近い測定値を選定する。なお、データが2つの場合においてはキースタディ  
441 を1つに絞り込むことはできない。この場合には、2つのデータをキースタディとし、  
442 化学物質のヘンリー定数としては2つのデータの算術平均値を採用する。
- 443 ③ 信頼性ランク「2」に該当するデータが複数ある場合は、②と同様に選定する。
- 444 ④ 推定によるヘンリー定数を選定する。
- 445 ・ キースタディ選定ルールに基づき決定された水に対する溶解度の値が「1 mol/L」未満  
446 の場合は、次の計算式<sup>16</sup>によるヘンリー定数を選定する。

$$H=VP/(WS/MW)$$

- 449
- 450 このとき、キースタディ選定ルールに基づき決定された水に対する溶解度 (WS) 及び  
451 蒸気圧 (VP) の値 (ただし測定値に限る。すなわち「2C」のデータを除く。) を用い  
452 る。
- 453 ・ キースタディ選定ルールに基づき決定された水に対する溶解度が「1 mol/L」以上の場  
454 合は、HENRYWIN (EPI Suite) によるヘンリー係数の推定値<sup>17</sup>を選定する。

#### 455

#### 456 4.7 解離定数 (酸解離定数) (pKa)

##### 457 使用可否基準

- 458 表1の信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択する。
- 459 酸解離定数に関しては、水溶媒中におけるデータを使用し、水溶媒中以外のデータは使  
460 用不可とする。

##### 461

##### 462 キースタディ選定ルール

- 463 使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選定する。
- 464 ① 信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も信頼性が高いデータが1つであれば、  
465 それを選定する。

---

<sup>16</sup> William M. Meylan and Philip H. Howard (1991) Bond Contribution Method for Estimating Henry's Law Constants, Environmental Toxicology and Chemistry, 10, pp1283-1293, H (ヘンリー則定数; Pa・m<sup>3</sup>/mol)、VP (蒸気圧; Pa)、WS (水溶解度; mg/L)、MW (分子量)。

<sup>17</sup> HENRYWIN では、化合物の結合の種類と数による Bond Contribution Method、化合物の置換基の数と種類による Group Contribution Method 及び構造が似ている Henry 則定数既知化合物の Bond Contribution Method を組み合わせた Experimental Value Adjusted Method が実装されているが、より精度が高いと考えられる Bond Contribution Method の値を用いる。なお、計算式 (H=VP/(WS/MW)) は水溶解度が高い物質の場合、ヘンリー則定数が低く見積もられ、他の手法を用いるのが良いとされている。HENRYWIN の開発者は水溶解度が 1mol/L 未満の化学物質には計算式 (H=VP/(WS/MW)) を推奨するとしている。

- 466 ② 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合は、その算術平均値を求め、算  
467 術平均値の算出に用いた各データが算術平均値 $\pm 1.0$  以内<sup>18</sup>である場合は算術平均値に  
468 最も近い測定値を選定する。算術平均値 $\pm 1.0$  を超えるデータがある場合は、そのデー  
469 タを除いた残りのデータの算術平均値を求め、その値に最も近い測定値を選定する。  
470 なお、データが2つの場合においてはキースタディを1つに絞り込むことはできない。  
471 この場合には、2つのデータをキースタディとし、化学物質の pKa としては2つのデー  
472 タの算術平均値を選定する。
- 473 ③ 信頼性ランク「2」に該当するデータが複数ある場合は、②と同様に選定する。
- 474 ④ SPARC による pKa の推定値を選定する。

475

#### 476 4.8 1-オクタノールと水との間の分配係数 (log Pow、log Kow と呼ぶ場合もある。)

##### 477 使用可否基準

- 478 表1の信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択する。
- 479 信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ランク「4」  
480 のデータを暫定的に使用する。

481

##### 482 キースタディ選定ルール

- 483 使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選定する。
- 484 ① 信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も信頼性が高いデータが1つであれば、  
485 それを選定する。
- 486 ② 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合は、「 $-2.0 < \log \text{Pow} \leq 4.0$ 」<sup>19</sup>の  
487 ときはフラスコ振とう法、「 $4.0 < \log \text{Pow} \leq 6.0$ 」<sup>20</sup>のときは HPLC 法による値を優先す  
488 る。
- 489 データが複数ある場合：算術平均値を求め、算術平均値の算出に用いた各データが算  
490 術平均値 $\pm 1.0$  以内<sup>21</sup>である場合は算術平均値に最も近い測定値を選定する。算術  
491 平均値 $\pm 1.0$  を超えるデータがある場合は、そのデータを除いた残りのデータの算  
492 術平均値を求め、その値に最も近い測定値を選定する。なお、データが2つの場  
493 合においてはキースタディを1つに絞り込むことはできない。この場合には、2つ  
494 のデータをキースタディとし、化学物質の log Pow としては2つのデータの算術平  
495 均値を選定する。
- 496 ③ 信頼性ランク「2」に該当するデータが複数ある場合、②と同様に選定する。
- 497 ④ KOWWIN (EPI Suite) による log Pow の推定値を選定する。

498

<sup>18</sup> REACH の技術ガイダンスでの測定値の変動係数 $\pm 0.1$  を参考に設定。

<sup>19</sup> OECD TG 107 及び JIS K 7260-107 に示されている適用範囲に基づき設定。

<sup>20</sup> OECD TG 117 及び JIS K 7260-117 に示されている適用範囲に基づき設定。

<sup>21</sup> REACH の技術ガイダンスでの測定値の併行精度 $\pm 0.1 \sim \pm 0.3$  を参考に設定。

## 4.9 生分解性

### 使用可否基準

表1の信頼性ランク「1」又は「2A、2B（2Cは除く）」に該当する次の条件に合致するデータをスクリーニング評価等に利用可能なデータの候補とする。

- ・化審法の判定に使われたデータ
- ・化審法の試験法通知等に準じた試験法による試験データ
- ・OECD テストガイドライン301「Ready Biodegradability（易生分解性）」シリーズ及び310「Ready Biodegradability – CO<sub>2</sub> in sealed vessels (Headspace Test)（易生分解性-密閉容器中のCO<sub>2</sub>（ヘッドスペース試験）」に準拠した試験結果
- ・「信頼性が高いと認められる情報源」（3 参照）からの測定データ

データは、被験物質についての直接分析を実施し分解率を明らかにしていること、及び分解生成物を同定していることを前提とする。また、OECD テストガイドライン 302C 単独での情報は生分解性の情報として利用しない。類似物質の情報を元に判定可能な物質がある場合も、スクリーニング評価等に利用可能なデータの候補とする。

信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。この場合においても、分解率を明らかにしていること、及び、分解生成物を同定していることが前提となる。

516

### キースタディ選定ルール

使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選択する。

- ① 化審法において当該化学物質又は類似物質の生分解性データに基づき判定がなされている場合はそれを選定する。
- ② 信頼性ランク「1」のデータのうち、化審法の試験法通知等に準じた試験法による試験データに該当するデータがあれば、それを選定する。
- ③ 信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も信頼性の高いデータが1つであれば、それを選定する。
- ④ 信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も信頼性の高いデータが複数ある場合は審議会の判断とする。

527

### 良分解性の判断について

化審法における判定を経ない物質の場合は、審議会等での判断を経ることを原則とする。特に、スクリーニング評価等で「良分解性」として扱う物質についてはあらかじめ審議会等において分解性判断を経ることとする。表3に示す1つ以上の方法でそれぞれのパスレベルを超える結果が得られた場合には審議会等において「生分解性」判断を行うための資料として提出する。

534

535

536

表3 OECDテストガイドライン301・310におけるパスレベル

試験法	301A	301B	301C	301D	301E	301F	310
	DOCダイア ウェイ法	修正 Strum 法	修正 MITI法 (I)	クローズド ボトル法	修正 OECD スクリーニ ング法	マノメーター 呼吸測定法	
生分解性 指標	DOC 除去率	CO <sub>2</sub> 発生率	BOD 除去率	BOD 除去率	DOC 除去率	BOD 除去率	ThIC 発生率
試験期間	28 日間	28 日間	28 日間	28 日間	28 日間	28 日間	28 日間
パスレベル	≥70%	≥60%	≥60%	≥60%	≥70%	≥60%	≥60%

537

538 4.10 生物濃縮性(BCF)

539 使用可否基準

540 表1の信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択する。

541 信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ランク「4」  
542 のデータを暫定的に使用する。

543

544 キースタディ選定ルール

545 使用可否基準に合致したデータの中から、次の順番に従ってキースタディを選定する。

- 546 ① 化審法の濃縮度試験による生物濃縮性の判定に用いたデータがあればそれを選定する。  
547 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  
548 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  
549 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  
550 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  
551 いる場合は最大値を用いる。
- 552 ② 化審法の濃縮度試験による生物濃縮性の判定に用いたデータがない場合、信頼性ラン  
553 ク「1」又は「2」に該当する最も信頼性の高いデータが1つであれば、それを選定  
554 する。
- 555 ③ 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合は、その中の最大値を選定する。
- 556 ④ 信頼性ランク「2」に該当するデータが複数ある場合は、その中の最大値を選定する。
- 557 ⑤ BCF 測定値がなく、分子量が 800 以上（ハロゲン元素を 2 個以上含む化合物にあって  
558 は分子量 1000 以上）の場合、logBCF に一律 2.0 を用いる。なお、この場合、信頼性  
559 ランクは「2C」相当とする。
- 560 ⑥ BCF 測定値がなく分子量 800 未満（ハロゲン元素を 2 個以上含む化合物にあっては分  
561 子量 1000 未満）の場合、以下の⑥-1、⑥-2 と⑥-3 により選定する(優先度：(高) ⑥  
562 -1 >⑥-2 > ⑥-3 (低))。このとき、キースタディ選定ルールに基づき決定された  
563 logPow の値を用いる。  
564 なお、log BCF の計算結果が 0.5 以下になった場合は一律 0.5 を用いる。  
565 ⑥-1 分配係数の試験結果により化審法に基づく生物濃縮性の判定が行われている場合

566 (log Pow が 3.5 未満)

567 対象物質が脂肪族炭化水素、芳香族炭化水素及びそのハロゲン化物等（カテゴリー  
568 I「単純受動拡散カテゴリー」及びカテゴリーII-A「水素結合アクセプターによる双  
569 極子-双極子相互作用が受動拡散に影響を与える物質群」に分類されるものに限る。）  
570 の場合は（式1）<sup>22</sup>を用いる。

571 
$$\log BCF = 1.05 \times \log Pow - 1.71 \quad (\text{式 1})$$

572

573 それ以外の物質の場合は BCFBAFWIN (EPI Suite)、濃縮性予測システム(CERI モ  
574 デル)及び BCF base-line model(OASIS Catalogic) の3つの QSAR モデルによる推定値の算術  
575 平均値を用いる。

576

577 ⑥-2 分配係数の試験結果により化審法に基づく生物濃縮性の判定が行われていない場合  
578 であって log Pow が 6.0 未満の場合

579 対象物質が脂肪族炭化水素、芳香族炭化水素及びそのハロゲン化物等（カテゴリー I  
580 「単純受動拡散カテゴリー」及びカテゴリーII-A「水素結合アクセプターによる双極  
581 子-双極子相互作用が受動拡散に影響を与える物質群」に分類されるものに限る。）で  
582 log Pow が測定値の場合は上記（式1）を用いる。log Pow が推定値の場合は（式2）<sup>20</sup>  
583 を用いる。

584 
$$\log BCF = 1.03 \times \log Pow - 1.48 \quad (\text{式 2})$$

585

586 それ以外の物質の場合は BCFBAFWIN (EPI Suite)、濃縮性予測システム(CERI モ  
587 デル)及び BCF base-line model(OASIS Catalogic) の3つの QSAR モデルによる推定  
588 値の算術平均値を用いる。

589

590 ⑥-3 log Pow が 6.0 以上の場合

591 BCFBAFWIN (EPI Suite)、性濃縮性予測システム(CERI モデル)及び BCF base-line  
592 model(OASIS Catalogic)の3つの QSAR モデルによる推定値の算術平均値を用いる。

593

## 594 5. スクリーニング評価・リスク評価における性状データ選定の全体像

595 性状データの選定について、リスク評価(一次)評価II以降における精査等も含めた概念  
596 的全体像を図2に示す。

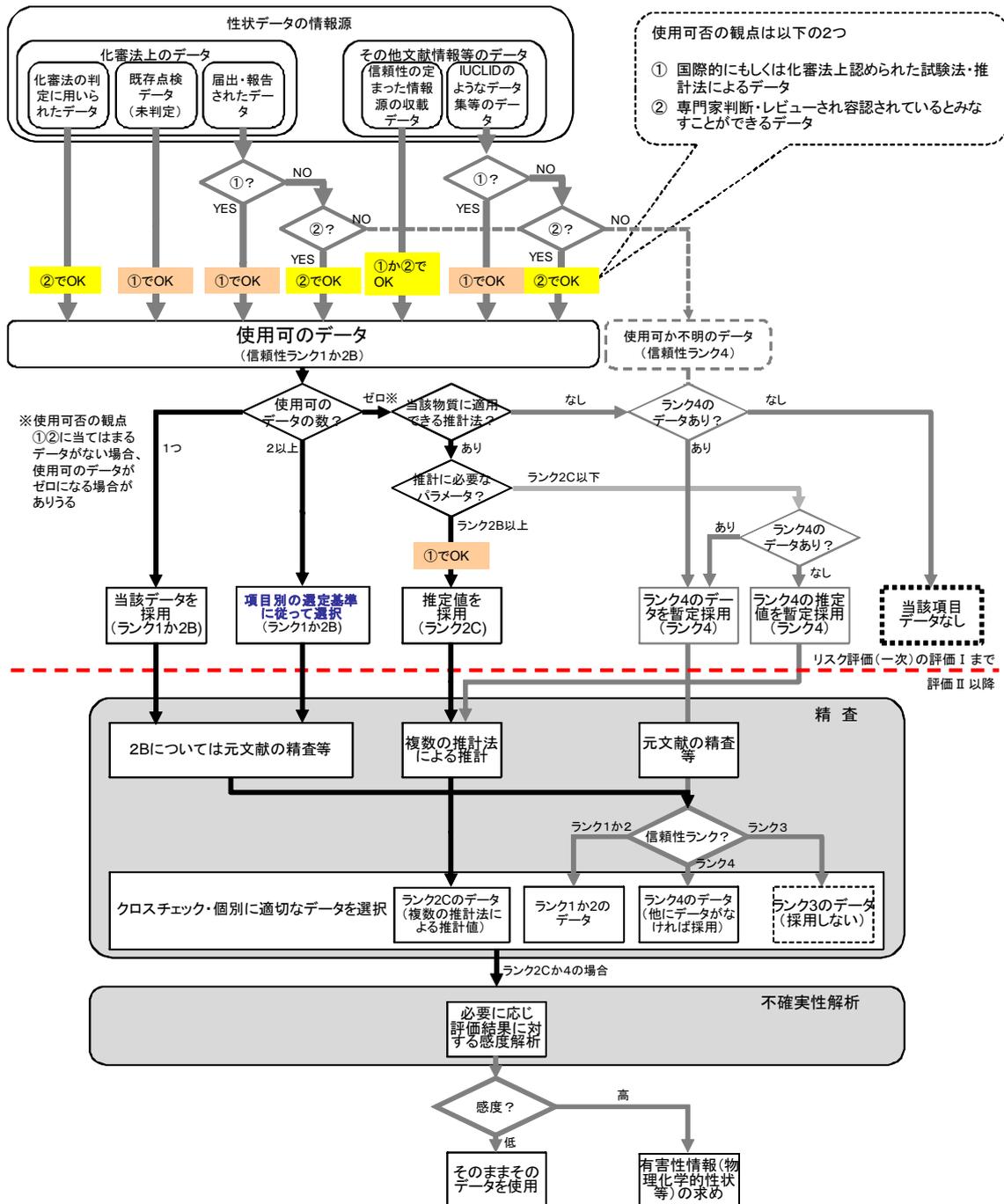
597 本基準は、図の上段のスクリーニング評価等までの段階において用い、そこで選定され  
598 たデータの信頼性ランク等に応じて、リスク評価(一次)評価II以降に精査等を行うことを  
599 想定している。

---

<sup>22</sup> NITE の構造活性相関委員会による「カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書（カテゴリーI）」（平成21年10月20日）及び「カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書（カテゴリーII-A）」（平成22年12月14日）からの引用。

600  
601  
602

## 性状データ選定の全体像



603  
604

605

図2 性状データ選定の概念的全体像

606

607

608 **6. 国が既知見を収集する情報源の範囲**

609 物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データに関して、国が既知見を収集する情報源  
610 の範囲は原則、「3. 信頼性が定まった情報源」及び EU ECHA(European Chemicals Agency)  
611 の Information on Registered Substances とする。

612 なお、上記以外の情報源による既知見を国が入手した場合は1. ～4. に則った基準に  
613 より評価に用いるデータの選定を行う。

614

615

(参考1)

## 「OECD-HPV 化学物質点検マニュアル」での信頼性の考え方

Klimisch らによる信頼性評価基準は、信頼性のないデータを取り除くため試験報告書の初期スクリーニングを支援する目的で Klimisch らにより開発された代表的なデータの信頼性を評価するための基準である。本基準は、生態毒性試験と健康への影響試験について信頼性をランク化する方法を導入しており、各ランクは以下の通り、ランク番号が小さいもの程信頼性が高く、信頼性ランク 1 または 2 と評価されるデータが採用できるものとしている。

信頼性ランク 4 に該当する二次文献・資料については、元文献・情報が信頼性ランク 1 または 2 である可能性を排除できないが、本選定方法においては原則として元文献・情報に遡及することなく二次文献・資料で判断する。なお、リスク評価(一次)評価Ⅱ以降において元文献・情報の精査を排除するものではなく、この段階において、必要に応じて元文献・情報の信頼性評価を行うものとする。

### ○信頼性ランク 1

「Reliable without restriction (信頼性あり (制限なし))」

妥当性が確認されたまたは国際的に認められたテストガイドライン (GLP が望ましい) に従って実施された試験又はデータ、又は記載された試験項目が特定の (国レベルの) テストガイドラインに基づいているもの、又は記載されたすべての試験項目がテストガイドラインと密接に関連しているか同等である試験又はデータ。

### ○信頼性ランク 2

「Reliable with restrictions (信頼性あり (制限付き))」

記載された試験項目は、特定のテストガイドラインと完全には一致していないが、当該データは十分許容されるもの、又は記載項目はテストガイドラインに含めることはではないが、詳細な記述がなされており科学的に許容される (ほとんどのものは GLP に従ってはいない) 試験又はデータ。

### ○信頼性ランク 3

「Not reliable (信頼性なし)」

測定系と試験物質の間に干渉が生じていたり、用いた生物/試験系への暴露が妥当ではなかったり (例えば、非生理的な投与経路)、許容できない方法に従って実施、又は作られ、記載が評価するには不十分であったり、専門家が判断する上でも説得力がない試験及びデータ。

- 652 ○信頼性ランク 4  
653 「Not assignable (評価不能)」  
654 実験の詳細が十分に示されておらず、短い要約又は二次文献・資料（書籍、レビュー等）  
655 に羅列されているだけの試験及びデータ。  
656  
657 出典：  
658 Klimisch, H.J., Andreae, E. and Tillmann, U. (1997) A systematic approach for evaluating the quality of  
659 experimental and ecotoxicological data. Reg. Tox. Pharm., 25, 1-5.  
660

(参考2)

## 「Japan チャレンジスポンサーマニュアル」での信頼性ランク分類の目安

### 1. 既存情報に関する信頼性評価の事例

国の既存点検結果については、確立した試験方法で適切に実施されていますので、信頼性評価の必要はありません。このため、ここでは信頼性評価の対象となる既存の文献情報と、自社データのそれぞれについて、使用可能性があるか、無いかの判断の事例を説明します。信頼性評価の基準には、科学的に説明可能なものとして専門家が見て容認できるかどうかといった、専門的な判断を必要とする場合があります。各情報収集項目に対応した政府事務局の相談窓口が、必要な助言（必要に応じて専門家の紹介や打ち合わせ日程の設定等を含む）を行いますのでご相談ください。

#### (1) 使用可能性がある情報

Japan チャレンジプログラムにおいて使用可能と考えられる文献情報は、以下の通りです。

- ・元文献を入手した結果、当該試験が国際的に認められたテストガイドラインに従い、GLPで実施された試験報告であった場合（OECD 信頼性ランク 1 に該当）
  - ・元文献を入手した結果、当該試験が国際的に認められたテストガイドラインに準じて実施された試験報告であって、様式（テンプレート）に十分な情報が記載できるとともに、テストガイドラインからの逸脱について説明可能なもの。（OECD 信頼性ランク 2 に該当）
  - ・信頼性の定まったデータベース（メルクインデックス等）に収録されているデータ（OECD 信頼性ランク 2 に該当）
  - ・科学的に説明可能なもの（専門家の判断用として容認できる研究又はデータ）
- また、自社データについても、以下のとおり文献情報と同じような考え方で評価が出来ます。
- ・国際的に認められたテストガイドラインに従い、GLPで実施された試験報告。（OECD 信頼性ランク 1 に該当）
  - ・国際的に認められたテストガイドラインに準じて実施された試験報告であって、様式に十分な情報が記載できるとともに、テストガイドラインからの逸脱について説明可能なもの。（OECD 信頼性ランク 2 に該当）
  - ・雑誌等に投稿されて公表された試験報告であって、様式（テンプレート）に十分な情報が記載できるとともに、テストガイドラインからの逸脱について説明可能なもの。（OECD 信頼性ランク 2 に該当）
  - ・科学的に説明可能なもの（専門家の判断用として容認できる研究又はデータ）

#### (2) 使用可能性のない情報

使用可能性のない情報は以下の通りです。

- ・上記（1）以外の試験報告（OECD 信頼性ランク 3 に該当、例：不適切な実験方法で実

697 施された実験結果、評価のための記載が不十分な報告、実験結果の解釈に確実性を欠  
698 くデータ)

699 ・評価できないもの (OECD 信頼性ランク 4 に該当、例 : MSDS 等)

700

701 2. 信頼性が高いと認められる情報源

702 ここでは、信頼性の高いと認められる情報源について説明します。これら情報源に収載  
703 されている情報については、原則として原文献又は元データの信頼性評価を要さないと考え  
704 られますが、試験の実施時期が相当古いなど、特殊なケースでは、これらの情報源から  
705 のデータでも信頼性の評価が必要な場合もあり得ますので、適宜信頼性評価窓口にご相談  
706 ください。

707

708 (1) OECD-HPV化学物質点検マニュアルに記載されているもの<sup>23</sup>

709 OECD-HPV化学物質点検マニュアルに記載されている信頼性の高いと認められる情報源  
710 は以下のとおりです。

- 711 ・ The Merck Index – (物理化学的性状)
  - 712 ・ Hawley's Condensed Chemical Dictionary – (物理化学的性状、用途)
  - 713 ・ Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology – (用途)
  - 714 ・ Patty's Industrial Hygiene and Toxicology – (ヒト健康影響)
  - 715 ・ US EPA IRIS (Integrated Risk Information System) – (ヒト健康影響, NOAELs, RfDs,  
716 RfCs and cancer slope factors)
  - 717 ・ ATSDR (The Agency for Toxic Substances and Disease Registry) Toxicological Profiles  
718 – (ヒト健康影響、用途、暴露情報)
  - 719 ・ NTP (National Toxicology Program) Study Report – (ヒト健康影響、用途、暴露情  
720 報)
  - 721 ・ IARC (International Agency for Research on Cancer) Monographs on the Evaluation of  
722 Carcinogenic Risks to Humans – (ヒト健康影響、用途、暴露情報)
  - 723 ・ OSHA (Occupational Safety and Health Administration), ACGIH (American Conference  
724 of Industrial Hygienists), AIHA (American Industrial Hygiene Association) – (労働環  
725 境基準とその根拠)
- 726 その他の物理化学的性状に関する参考書
- 727 ・ Lide's CRC Handbook of Chemistry and Physics.
  - 728 ・ Beilstein Handbook of Organic Chemistry.
  - 729 ・ SAX's Dangerous Properties of Industrial Materials.
  - 730 ・ Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards.
  - 731 ・ Lange's Handbook of Chemistry.

---

<sup>23</sup> 原文に基づき修正・加筆した。

- 732 • Fire Protection Guide on Hazardous Materials (NFPA; National Fire Protection
- 733 Association).
- 734 • Dust Explosions in the Process Industry ( R.K. Eckhoff).
- 735
- 736
- 737
- 738
- 739
- 740
- 741
- 742
- 743
- 744
- 745
- 746
- 747
- 748
- 749
- 750
- 751
- 752
- 753
- 754
- 755
- 756
- 757
- 758
- 759
- 760
- 761
- 762
- 763
- 764
- 765
- 766
- 767
- 768

769

770

## 単位の換算

771

772 算術平均値の算出等を行う場合、単位変換は次式に従う。

773 ① 温度の換算<sup>24</sup>

774  $^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow \text{K} : T(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273.15$

775  $^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow ^{\circ}\text{F} : T(^{\circ}\text{C}) = 5/9 [t(^{\circ}\text{F}) - 32]$

776 ② 圧力の換算<sup>25</sup>

777  $\text{mmHg} \Leftrightarrow \text{Pa} : 1\text{Torr}(\text{mmHg}) = 1.333 \times 10^2 \text{Pa}$

778  $\text{気圧} \Leftrightarrow \text{Pa} : 1 \text{気圧} = 1.013 \times 10^5 \text{Pa}$

779 ③ 水に対する溶解度の換算

780 水の比重は 1.000 として計算する。

---

<sup>24</sup> OECD テストガイドライン 102 から引用

<sup>25</sup> OECD テストガイドライン 103 から引用 (一部修正)