

イオン性を有する新規化学物質の生物蓄積性の判定について（お知らせ）

平成26年6月30日

厚生労働省医薬食品局審査管理課化学物質安全対策室
経済産業省製造産業局化学物質管理課化学物質安全室
環境省総合環境政策局環境保健部企画課化学物質審査室

新規化学物質の届出に係る法第4条第1項に基づく判定については、「新規化学物質に係る試験並びに優先評価化学物質及び監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令」に定められた試験成績の他、すでに得られているその他の知見に基づいて判定することとされています。

新規化学物質の生物蓄積性については、これまでにおいても、オクタノール／水分配係数に基づく判定を一部実施しておりますが、試験に要する費用・期間の効率化の重要性や国際的な動物試験削減の要請にかんがみ、動物を用いた試験によらずに評価・判定できるとする範囲をさらに拡大していくことが重要であると考えております。また、規制改革実施計画（平成25年6月）においても、安全性と新規化学物質の開発に要する費用や期間の効率化の両立を図るため、合理化できるところから検討を進めることとされているところです。

こうしたことから、今般、イオン性を有する新規化学物質の生物蓄積性を、中性付近（ $\text{pH} = 7$ 付近）で測定した見かけのオクタノール／水分配係数から評価・判定する基準の案を別紙のとおりとりまとめました。

今後当面の間は、本案を評価の目安として事前相談に対応することとし、その経験を踏まえて適用範囲等について引き続き検討を深め、生物蓄積性の評価・判定の合理化を進めてまいります。

(別紙)

イオン性を有する新規化学物質の中性付近 ($pH=7$ 付近) で測定した見かけのオクタノール/水分配係数 ($\log D$) に基づく判定について (案)

非解離状態における $\log Pow$ を測定することが困難なスルホン酸、カルボン酸、両性イオン化合物、4級アミンなどのイオン性化合物について、中性付近 ($pH=7$ 付近) で測定した見かけのオクタノール/水分配係数 ($\log D$) が 2.5 未満の場合は、高濃縮性でないと判定できることとする。

なお、トリフルオロメチル基又はテトラフルオロエチレン基を構造の一部に有する化合物には本ルールは適用しない。

(注1) 本ルールにおいて「非解離状態における $\log Pow$ を測定することが困難なイオン性化合物」とは、原則として、酸であれば $pKa < 3$ 、塩基であれば $pKa > 11$ のものとする。

(注2) 慎重を期すため、本ルールをいきなり判定基準として位置づけるのではなく、事例を重ねつつ適用範囲等に問題がないことを確認することとする。そのため、当面は事前に事務局に相談することを必須とし、生物蓄積性に広い知見を有する審議会委員 (数名) と事務局において、構造式や pKa などの情報から相談された化学物質が本ルールの適用対象として問題ないかどうか判断することとする。

(注3) 現行の判定基準における $\log Pow$ の取扱と同様に、界面活性のある物質、分子量分布を有する混合物、有機金属化合物、純度の低い物質 (HPLC法を除く) 及び無機化合物には適用しない。