

1 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 2 の信頼性評価等について（案） 3 4

5 はじめに

6 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、
7 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
8 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
9 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
10 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。

11 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
12 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
13 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
14 ースタディ）の選定ルールについて規定する。

15 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
16 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
17 係数、ヘンリー係数¹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
18 関するデータである。

19 これらの性状データの情報源は次の（ア）～（ウ）に大別される。

20
21 （ア）化審法上のデータ²

22 （イ）上記（ア）以外の文献情報等のデータ

23 （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。）
24

25 スクリーニング評価等に必要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
26 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
27 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
28 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
29 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
30 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
31 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。）
32 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
33 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、

¹ 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。

² 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 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
35 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
36 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
37 を設定する。

38

39 1. 性状データに関する選定基準の考え方

40 1.1 信頼性ランクと使用可否基準

41 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
42 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
43 頼性ランク 4）」の 4 つの信頼性ランクに分類する。

44 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
45 1）、「Japan チャレンジスポンサーマニュアル³」での信頼性ランク分類の目安（参考 2）
46 を参考に整理したものであり、

47 (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
48 るか

49 (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
50 るデータであるか

51 の 2 つの観点から分類している（表 1）。

52

53 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
54 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。

55 信頼性ランク「3」に該当する性状データは、使用しない。

56 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。

57 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
58 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。

59

60 (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
61 使用する場合には、精査等を行うこととする。

62

63 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
64 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
65 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
66 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」
67 の「使用可否基準」を参照。

68

³ 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 【信頼性ランク 1 (信頼性あり (制限なし))】

- 70 ・化審法通知⁴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
71 法 (参考 3) によるもので GLP 準拠のもの (信頼性ランク 1 A)。
72 ・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
73 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
74 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
75 る。) (信頼性ランク 1 A)。
76 ・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
77 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)。
78 ・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。

79

80 【信頼性ランク 2 (信頼性あり (制限付き))】

- 81 ・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
82 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
83 データ (信頼性ランク 2 A)。
84 ・「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
85 性ランク 2 B)。
86 ・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)。

87

88 【信頼性ランク 3 (信頼性なし)】

- 89 ・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
90 ータ。

91

92 【信頼性ランク 4 (評価不能)】

- 93 ・試験法及び情報源が不明なデータ。
94 ・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。

95

96

97

⁴ 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、環保企発第 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。		

99

100 1.2 キースタディ選定ルール

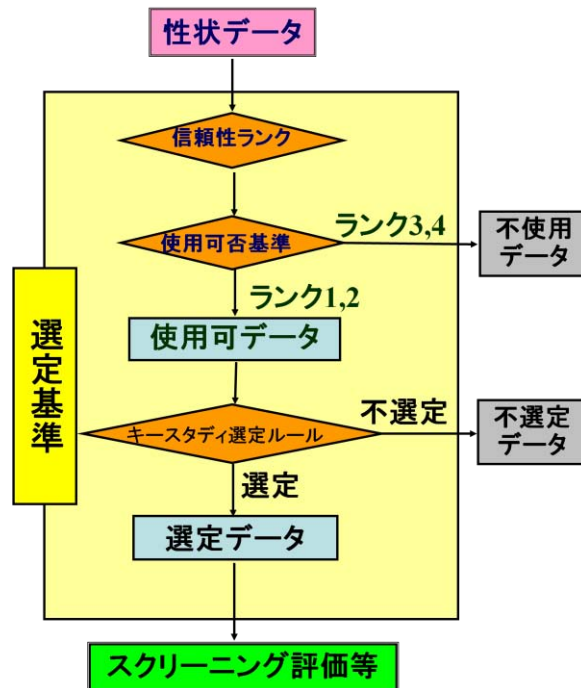
101 スクリーニング評価等に使用する性状データは、信頼性ランク「1」又は「2」に該当
 102 するものの中から信頼性ランクの高いものから優先的に選択する (信頼性ランクの高いも
 103 の : 1A > 1B > 2A > 2B > 2C)。最も高い信頼性ランクにデータが複数ある場合は、性状デー
 104 タごとに設定するキースタディ選定ルールによって決定する⁵ (「4. 性状の項目別の使用可
 105 否基準とキースタディ選定ルール」の「キースタディ選択ルール」を参照)。

106

107 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

⁵ 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。

108 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
 109 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
 110 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
 111 しを行う。



112

113

114 図1 物性データに関する概念的選定基準

115

116

117 2. 国際的に、もしくは化審法上認められた試験法等

118 2.1 試験法

119 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
 120 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。

121 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。

122

123 (1) 融点

124 ① OECD TG 102 (Melting Point/ Melting Rang)

125 ② JIS K 0064 (化学製品の融点及び溶融範囲測定方法)

126 ③ JIS K 0065 (化学製品の凝固点測定方法)

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

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

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

- 130 ⑦ EPA OPPTS 830.7200 (Melting Point / Melting Range)
131
- 132 (2) 沸点
- 133 ① OECD TG 103 (Boiling point/boiling range)
134 ② JIS K 0066 (化学製品の蒸留試験方法)
135 ③ ISO 918 (Volatile organic liquids for industrial use – Determination of distillation
136 characteristics)
137 ④ ISO 3924 (Petroleum products – Determination of boiling range distribution – Gas
138 chromatography method)
139 ⑤ ISO 3405:1988 (Petroleum products – Determination of distillation characteristics)
140 ⑥ EPA OPPTS 830.7220 (Boiling Point / Boiling Range)
141
- 142 (3) 蒸気圧
- 143 ① OECD TG 104 (Vapour Pressure Curve)
144 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)
145 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)
146 ④ ISO 3007 (Petroleum products and crude petroleum – Determination of vapor pressure –
147 Reid method)
148 ⑤ EPA OPPTS 830.7950 (Vapor Pressure)
149
- 150 (4) 水に対する溶解度
- 151 ① OECD TG 105 (Water Solubility)
152 ② EPA OPPTS 830.7840 (Water Solubility)
153 ③ EPA OPPTS 830.7860 (Water Solubility Generator Column Method)
154
- 155 (5) 有機炭素補正土壌吸着係数
- 156 ① OECD TG 121 (Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on Sewage
157 Sludge using High Performance Liquid Chromatography (HPLC))
158 ② OECD TG 106 (Adsorption -Desorption Using a Batch Equilibrium Method)
159 ③ EPA OPPTS 835.1110 (Activated Sludge Sorption Isotherm)
160 ④ EPA OPPTS 835.1220 (Sediment and Soil Adsorption / Desorption Isotherm)
161 ⑤ ISO 18747 (Water quality: adsorption of substances on activated sludge-batch test using
162 specific analytical method.)
163
- 164 (6) 解離定数 (酸解離定数)
165 OECD TG 112 (Dissociation Constants in Water)

166

167 (7) 1-オクタノールと水との間の分配係数

- 168 ① OECD TG 107 (Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method)
- 169 ② OECD TG 117 (Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid
- 170 Chromatography (HPLC) Method)
- 171 ③ OECD TG 123 (Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method)
- 172 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)
- 173 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)
- 174 ⑥ EPA OPPTS 830.7550 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Shake Flask Method)
- 175 ⑦ EPA OPPTS 830.7560 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Generator Column Method)
- 176 ⑧ EPA OPPTS 830.7570 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Estimation By Liquid
- 177 Chromatography)

178

179 (8) 生分解性

- 180 ① OECD TG 301A (DOC Die-Away)
- 181 ② OECD TG 301 B (CO₂ Evolution (Modified Sturm Test))
- 182 ③ OECD TG 301C (MITI (I) (Ministry of International Trade and Industry, Japan))
- 183 ④ OECD TG 301D (Closed Bottle)
- 184 ⑤ OECD TG 301E (Modified OECD Screening)
- 185 ⑥ OECD TG 301F (Manometric Respirometry)
- 186 ⑦ OECD TG 310 (Ready Biodegradability – CO₂ in sealed vessels (Headspace Test))

187

188 (9) 生物濃縮性⁶

- 189 ① OECD TG 305 (Bioconcentration: Flow-through Fish Test)
- 190 ② OECD TG 305 A (Bioaccumulation: Sequential Static Fish Test)
- 191 ③ OECD TG 305 B (Bioaccumulation: Semi-static Fish Test)
- 192 ④ OECD TG 305 C (Bioaccumulation: Test for the Degree of Bioconcentration in Fish)
- 193 ⑤ OECD TG 305 D (Bioaccumulation: Static Fish Test)
- 194 ⑥ OECD TG 305 E (Bioaccumulation: Flow-through Fish Test)
- 195 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)
- 196 ⑧ EPA OPPTS 850.1730 (Fish Bioconcentration Test)

197

198 2.2 推定方法

199 「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
200 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

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

201 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
 202 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
 203 る推定値は、信頼性ランク「4」（信頼性不明）とする⁷。

204 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
 205 に示す。

206

207

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 ⁷
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) ^{※1}	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) ^{※2}	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) ^{※3}	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) ^{※4}	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、珪素化合物及び金属化合物は適用外
	BCF base-line model (OASIS Catalogic) ^{※5}	SMILES 又は CAS 番号、Log Pow	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
ヘンリー係数	HENRYWIN (EPI Suite) ^{※6}	SMILES 又は CAS 番号	水に対する溶解度 ≥ 1 mol/L (4.6 参照) ^{※8}

⁷ 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。

	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}

- 208 ※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
 209 ※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
 210 ※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
 211 ※4: トレーニングセットの適用範囲: 記載なし
 212 ※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
 213 ※6: トレーニングセットの適用範囲: 分子量 (MW) = 26~451
 214 ※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)
 215
 216 ※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
 217 ※9: EPAのサイト (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
 218
 219
 220

221 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。

226 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。

232

233 3. 信頼性の定まった情報源

234 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。

236

237 3.1 信頼性が高いと認められる情報源

238 「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 (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
 239 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
 240

241 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
 242 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
 243 認を要さず⁸信頼性ありと判断する。

244 以下に掲げる情報源のうち、OECD の SIDS (Screening Information Data Set) において SIAR
 245 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
 246 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
 247 ことが確認できれば、原則信頼性ランク「1」に分類される。

248

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

259

260 3.2 専門家によるレビューを経ている情報源

261 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、
 262 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
 263 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
 264 信頼性ありと判断する。

265 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
 266 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。

267 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
 268 キースタディ > Reliability 1 > Reliability 2 とする。

269

- 270 ・ US/HPV チャレンジプログラム
- 271 ・ Japan チャレンジプログラム
- 272 ・ (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
 273 構・(独)製品評価技術基盤機構：「化学物質有害性評価書」
- 274 ・ 環境省環境リスク評価室：「化学物質の環境リスク評価」

⁸ 「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。

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

279

280 (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
281 する場合には、精査等を行うこととする。

282

283 3.3 専門家が信頼性ありと認めた情報源

284 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
285 さず信頼性ありと判断する。

286 表 1 の基準では、信頼性ランク「2B」と判断される。

287

- 288 ・ Sigma-Aldrich 試薬カタログ

289

290 (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以降に使用する
291 場合には、精査等を行うこととする。

292

293 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

294 4.1 融点

295 使用可否基準

296 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。

297 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、
298 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
299 均値を融点又は凝固点として扱う。

300 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
301 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
302 示する。

303 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」
304 のデータを暫定的に使用する。

305

306 キースタディ選定ルール

307 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。

308 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、
309 それを採用する。

310 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

311 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⁹である場合は算術平均値に
 312 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
 313 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。
 314 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。
 315 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
 316 タの算術平均値を採用する。

317 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。

318 ④ MPBPWIN (EPI Suite) による融点の推定値を選定する。

319

320 4.2 沸点

321 使用可否基準

322 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。

323 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。

324 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」
 325 のデータを暫定的に使用する。

326

327 キースタディ選定ルール

328 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。

329 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
 330 力 (101.3 kPa) における値に換算する¹⁰。

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

331

332 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、
 333 それを採用する。

334 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、
 335 以下のように選定する。

336 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。

337 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
 338 用いた各データが算術平均値±12.5°C以内¹¹である場合は算術平均値に最も近い
 339 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
 340 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
 341 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

⁹ 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。

¹⁰ 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)。

¹¹ 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。

342 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
343 ては2つのデータの算術平均値を採用する。

344 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。

345 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。

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

347

348 4.3 蒸気圧

349 使用可否基準

350 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。

351 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」
352 のデータを暫定的に使用する。

353

354 キースタディ選定ルール

355 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。

356 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¹²。

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

357

358

359 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、
360 それを採用する。

361 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
362 先し、以下のように選定する。

363 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。

364 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
365 算出に用いた各データが算術平均値±50%以内¹³である場合は算術平均値に最も近
366 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
367 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。
368 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
369 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
370 は2つのデータの算術平均値を採用する。

371 c. 20~25°C以外のデータが複数ある場合：20~25°Cに温度に近いデータを採用する。

¹² 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・m³/(mol・K))、H_{0vapor} は蒸発エンタルピー (5×10⁴ J/mol)。

¹³ 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。

- 372 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。
 373 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。
 374 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
 375 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。

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

376

377 4.4 水に対する溶解度

378 使用可否基準

- 379 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。
 380 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」
 381 のデータを暫定的に使用する。

382

383 キースタディ選定ルール

- 384 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。
 385 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¹⁴。

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

386

- 387 「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
 388 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
 389 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。

390

- 391 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
 392 用する。
 393 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
 394 し、以下のように選定する。
 395 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。
 396 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
 397 算出に用いた各データが算術平均値±30%以内¹⁵である場合は算術平均値に最も近
 398 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
 399 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。

¹⁴ 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・m³/(mol・K)]、H_{0solut}は溶解エンタルピー=1×10⁴ (J/mol)。

¹⁵ 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。

400 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
401 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
402 解度としては 2 つのデータの算術平均値を採用する。

403 c. 20～25°C以外のデータが複数ある場合： 20～25°Cに温度に近いデータを採用する。

404 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。

405 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。

406 ④ WSKOWIN (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
407 ー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。

408

409 4.5 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)

410 使用可否基準

411 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。

412 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」
413 のデータを暫定的に使用する。

414

415 キースタディ選定ルール

416 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。

417 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。

418 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、その値に
419 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を 1
420 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、化学
421 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。

422 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。

423 ④ KOCWIN (EPI Suite) による Koc の推定値を選定する。このとき、キースタディ選定
424 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
425 を除く。）を用いる。

426

427 4.6 ヘンリー定数

428 使用可否基準

429 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。

430 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」
431 のデータを暫定的に使用する。

432

433 キースタディ選定ルール

434 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。

435 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、

- 436 それを選定する。
- 437 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
 438 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
 439 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、
 440 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。
- 441 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。
- 442 ④ 推定によるヘンリー定数を選定する。
- 443 ・ 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
 444 の場合は、次の計算式¹⁶によるヘンリー定数を選定する。

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

- 445
- 446 **H=VP/(WS/MW)**
- 447
- 448 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
 449 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
 450 る。
- 451 ・ 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
 452 合は、HENRYWIN (EPI Suite) によるヘンリー係数の推定値¹⁷を選定する。

453

454 4.7 解離定数 (酸解離定数) (pKa)

455 使用可否基準

- 456 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。
- 457 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
 458 用不可とする。

460 キースタディ選定ルール

- 461 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。
- 462 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、
 463 それを選定する。
- 464 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

¹⁶ 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・m³/mol)、VP (蒸気圧; Pa)、WS (水溶解度; mg/L)、MW (分子量)。

¹⁷ 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。

465 術平均値の算出に用いた各データが算術平均値 ± 1.0 以内¹⁸である場合は算術平均値に
 466 最も近い測定値を選定する。算術平均値 ± 1.0 を超えるデータがある場合は、そのデー
 467 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。
 468 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。
 469 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
 470 タの算術平均値を選定する。

471 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。

472 ④ SPARC による pKa の推定値を選定する。

473

474 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。)

475 使用可否基準

476 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。

477 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」
 478 のデータを暫定的に使用する。

479

480 キースタディ選定ルール

481 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。

482 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、
 483 それを選定する。

484 ② 信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合は、「 $-2.0 < \log \text{Pow} \leq 4.0$ 」¹⁹の
 485 ときはフラスコ振とう法、「 $4.0 < \log \text{Pow} \leq 6.0$ 」²⁰のときは HPLC 法による値を優先す
 486 る。

487 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
 488 術平均値 ± 1.0 以内²¹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
 489 平均値 ± 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
 490 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
 491 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
 492 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
 493 均値を選定する。

494 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。

495 ④ KOWWIN (EPI Suite) による log Pow の推定値を選定する。

496

497 4.9 生分解性

¹⁸ REACH の技術ガイダンスでの測定値の変動係数 ± 0.1 を参考に設定。

¹⁹ 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。

²⁰ 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。

²¹ 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。

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 – CO₂ in sealed vessels (Headspace Test)（易生分解性-密閉容器中のCO₂（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。

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。

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 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 ₂ 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%

535

536 4.10 生物濃縮性(BCF)

537 使用可否基準

538 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。

539 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」
540 のデータを暫定的に使用する。

541

542 キースタディ選定ルール

543 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。

- 544 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。
545 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
546 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
547 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
548 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
549 いる場合は最大値を用いる。
- 550 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
551 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
552 する。
- 553 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。
- 554 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。
- 555 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
556 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
557 ランクは「2C」相当とする。
- 558 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
559 子量 1000 未満）の場合、以下の⑥-1、⑥-2 と⑤-3 により選定する(優先度：(高) ⑥
560 -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
561 logPow の値を用いる。
562 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。
- 563 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
564 (log Pow が 3.5 未満)

565 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
566 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
567 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。）
568 の場合は（式1）²²を用いる。

$$569 \quad \log BCF = 1.05 \times \log Pow - 1.71 \quad (\text{式 1})$$

570

571 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
572 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
573 平均値を用いる。

574

575 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
576 であって $\log Pow$ が 6.0 未満の場合

577 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
578 「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
579 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
580 $\log Pow$ 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）²⁰
581 を用いる。

$$582 \quad \log BCF = 1.03 \times \log Pow - 1.48 \quad (\text{式 2})$$

583

584 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
585 デル)及び BCF base-line model(OASIS Catalogic) の3つの QSAR モデルによる推定
586 値の算術平均値を用いる。

587

588 ⑥-3 $\log Pow$ が 6.0 以上の場合

589 BCFBAFWIN (EPI Suite)、性濃縮性予測システム(CERI モデル)及び BCF base-line
590 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。

591

592 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

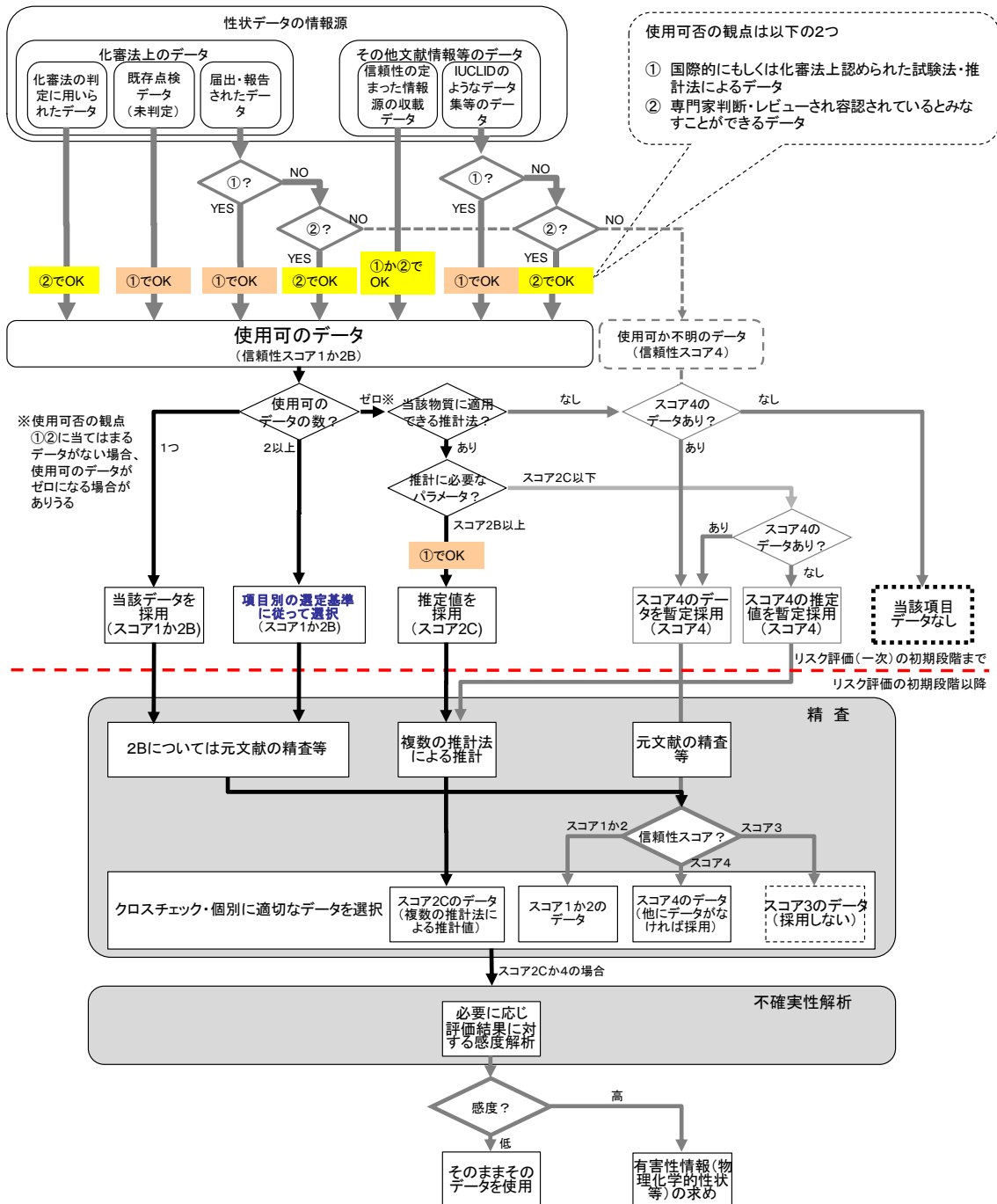
593 性状データの選定について、リスク評価(一次)評価II以降における精査等も含めた概念
594 的全体像を図2に示す。

595 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
596 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
597 想定している。

598

²² 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。

599
600



601
602
603
604
605

図 2 性状データ選定の概念的全体像

606

607 **6. 国が既知見を収集する情報源の範囲**

608 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
609 の範囲は原則、「3. 信頼性が定まった情報源」とする。

610 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
611 より評価に用いるデータの選定を行う。

612

613

(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

614
615
616
617
618
619
620
621
622
623
624
625
626
627
628
629
630
631
632
633
634
635
636
637
638
639
640
641
642
643
644
645
646
647
648
649

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。

- 650 ○信頼性ランク 4
651 「Not assignable (評価不能)」
652 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）
653 に羅列されているだけの試験及びデータ。
654
655 出典：
656 Klimisch, H.J., Andreae, E. and Tillmann, U. (1997) A systematic approach for evaluating the quality of
657 experimental and ecotoxicological data. Reg. Tox. Pharm., 25, 1-5.
658

(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

695 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
696 くデータ)

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

698

699 2. 信頼性が高いと認められる情報源

700 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
701 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思
702 えられますが、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
703 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
704 ください。

705

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

707 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
708 は以下のとおりです。

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

²³ 原文に基づき修正・加筆した。

- 730 • Fire Protection Guide on Hazardous Materials (NFPA; National Fire Protection
- 731 Association).
- 732 • Dust Explosions in the Process Industry (R.K. Eckhoff).
- 733
- 734
- 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

(参考 3)

767

768

単位の換算

769

770 算術平均値の算出等を行う場合、単位変換は次式に従う。

771 ① 温度の換算²⁴

772 $^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow \text{K} : T (\text{K}) = t (^{\circ}\text{C}) + 273.15$

773 $^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow ^{\circ}\text{F} : T(^{\circ}\text{C}) = 5/9 [t(^{\circ}\text{F}) - 32]$

774 ② 圧力の換算²⁵

775 $\text{mmHg} \Leftrightarrow \text{Pa} : 1\text{Torr} (\text{mmHg}) = 1.333 \times 10^2 \text{ Pa}$

776 $\text{気圧} \Leftrightarrow \text{Pa} : 1 \text{ 気圧} = 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$

777 ③ 水に対する溶解度の換算

778 水の比重は 1.000 として計算する。

²⁴ OECD テストガイドライン 102 から引用²⁵ OECD テストガイドライン 103 から引用 (一部修正)

1 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
2 の信頼性評価等について（案）

3 【主な変更点について】
4

5 1. 信頼性ランクの表現

6 (1) 修正箇所

7 「表 1」の他、該当する箇所。

8 (2) 修正内容

9 信頼性ランク 1～4 を順に、「信頼性あり（制限なし）」「信頼性あり（制限付き）」
10 「信頼性なし」「評価不能」という表現に修正・統一した。

11
12 2. 水-オクタノール分配係数の表記

13 (1) 修正箇所

14 「Kow」と記載していた箇所

15 (2) 修正内容

16 「Kow」から「Pow」に表記を改めた。
17

18 3. 試験法

19 (1) 修正箇所

20 「2.1 試験法」及び参考 3

21 (2) 修正内容

22 「2.1 試験法」及び参考 3 で分けて記載していた試験法を、「2.1 試験法」の中
23 に全て記載した。
24

25 4. 推定方法が適用できない場合の扱い

26 (1) 修正箇所

27 「1.2 キースタディ選定ルール」の脚注

28 (2) 修正内容

29 測定値が得られず、推定方法が適用できない場合の扱いについて、リスク評価ガイ
30 ダンスに定める旨の脚注を追加。
31

32 5. 選定されたデータの精査について

33 (1) 修正箇所

34 「1.2 キースタディ選定ルール」の文末

35 (2) 修正内容

36 リスク評価（一次）評価 I 終了以降に、専門家による総合的な観点から性状データ

37 について精査を行うこと、精査を踏まえて必要に応じてキースタディの見直しを行う
38 旨を追加。

39

40 6. 生物濃縮性の推定方法

41 (1) 修正箇所

42 表 2 及び「4.10 生物濃縮性 (BCF)」

43 (2) 修正内容

44 ① 表 2 について

45 4.10 生物濃縮性 (BCF) で追加した QSAR モデル「濃縮性予測システム (CERI モデル)
46 ル」と「BCF base-line model (OASIS Catalogic)」の情報を追加した。

47

48 ② 「4.10 生物濃縮性 (BCF)」について

49 BCF の測定値がなく、分子量が 800 以上 (ハロゲン元素を 2 以上含む化合物につ
50 いては分子量 1000 以上) の場合、 $\log BCF$ に一律 2.0 を用いる選定ルールを 4.10 ⑤
51 に追加。

52

53 Veith らによる回帰式「 $\log BCF = 0.85 \times \log Pow - 0.70$ 」を用いることをやめ、
54 カテゴリー I 又は II-A に該当しない場合は、下記の 3 つの QSAR 推定値の算術平均
55 値を用いることとした (4.10 ⑥-1, 2)。

56

57 QSAR による推定方法について、BCFBAFWIN (EPI Suite) のみの利用から、BCFBAFWIN
58 (EPI Suite)、濃縮性予測システム (CERI モデル) 及び BCF base-line model (OASIS
59 Catalogic) による推定値の算術平均値を用いる方法に変更した (4.10 ⑥-1, 2, 3)。

60

61

62 7. 信頼性の定まった情報源及び国が既知見を収集する情報源の範囲

63 (1) 修正箇所

64 「3.1 信頼性が高いと認められる情報源」「6. 国が既知見を収集する情報源の範
65 囲」

66 (2) 修正内容

67 ランク 1 として別扱いしていた OECD の SIDS をランク 1 のまま、「3.1 信頼性が高
68 いと認められる情報源」の中に位置付けた。また、同項目に「Lange's Handbook of
69 Chemistry, McGraw-Hill, 2005」を追加した。

70 これらの修正を行った上で、「3. 信頼性の定まった情報源」を「6. 国が既知見を収
71 集する情報源の範囲」として位置付けた。

72

73 8. キースタディ選定ルールの明確化

74 (1) 修正箇所

75 「4.2 沸点」「4.3 蒸気圧」「4.4. 水に対する溶解度」の「キースタディ選定ル
76 ール」他

77 (2) 修正内容

78 上記3つのエンドポイントは、圧力や温度等の記述があるデータを優先することと
79 していたが、旧選定基準では、例えば、「ランク1かつ圧力記載ないデータ」と、「ラ
80 ンク2で圧力記載のあるデータ」のいずれが優先されるか不明確であった。このため、
81 これを明確化し、ランクが優先されることを明らかにした。

82 これに伴い、こうした不明確な箇所のない「4.1 融点」等の他のエンドポイント
83 についても項目立てをあわせる修正を行った。

84

85 9. 性状データ選定の概念的全体像

86 (1) 修正箇所

87 図2

88 (2) 修正内容

89 「ゼロ」の表現に注意書きを追加した他、分かりやすさや整合性の観点から一部文
90 言を修正した。

91