

「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」
 の主な改訂点 補足説明資料

1. 信頼性ランク「4」の付け方、使用可否基準	該当箇所
<現行> 信頼性ランク「4」 使用可否基準：「原則使用不可」 ・試験法及び情報源が不明なデータ ・試験法等の詳細が不明で、信頼性ランク 2A か 3 かの判断ができないデータ <改訂後> 使用可否基準：信頼性ランク「1」、「2」のデータがない場合のみ、暫定的に使用。 ・「4A」：試験条件及び情報源等が不明な測定値データ ・「4C」：推計値を元にした推計値、推計条件が不明な推計値	P2 図表 1 「信頼性ラ ンク、信頼性 基準及び使 用可否基準」

○改訂の背景等

- ・情報収集の結果、信頼性ランク「1」、「2」に該当するデータがなく、暫定的にランク「4」のデータを使用するケースが出てきたため（表 1）、信頼性ランク「4」の使用可否基準を「原則使用不可」から「信頼性ランク「1」、「2」のデータがない場合のみ、暫定的に使用」に変更した。
- ・信頼性ランク「4」のデータの中には、測定値と推計値が混在していたため、測定値を優先して採用できるよう、「4A」（試験条件及び情報源等が不明な測定値データ）と「4C」（推計値を元にした推計値、又は推計条件等が不明な推計値）に細分化し、測定値データを優先して採用するルールとした。

表 1 優先評価化学物質（140 物質）の物理化学的性状の採用値
 信頼性ランク内訳（数字はデータ数）

信頼性 ランク	融点	沸点	蒸気圧	水溶解度	logPow	Koc	ヘンリー 係数	BCF
1A	13 (9%)	7 (5%)	25 (18%)	29 (21%)	40 (29%)	10 (7%)	0 (0%)	35 (25%)
1B	20 (14%)	11 (8%)	16 (11%)	43 (31%)	39 (28%)	8 (6%)	0 (0%)	10 (7%)
2A	58 (41%)	37 (27%)	42 (30%)	25 (18%)	26 (19%)	5 (4%)	23 (17%)	0 (0%)
2B	39 (28%)	62 (45%)	38 (27%)	27 (19%)	19 (14%)	47 (34%)	64 (47%)	0 (0%)
2C	8 (6%)	20 (14%)	7 (5%)	5 (4%)	16 (11%)	56 (40%)	45 (33%)	79 (57%)
3	0 (0%)	0 (0%)	0 (0%)	0 (0%)	0 (0%)	0 (0%)	0 (0%)	0 (0%)
4A	2 (1%)	2 (1%)	0 (0%)	3 (2%)	0 (0%)	0 (0%)	1 (1%)	0 (0%)
4C	0 (0%)	0 (0%)	12 (9%)	8 (6%)	0 (0%)	14 (10%)	2 (2%)	15 (11%)

2. 国際的にもしくは化審法上認められた試験法等	該当箇所
<現行> 国際的にもしくは化審法上認められた試験法等として、OECD、JIS、ISO、EPAの試験法を記載。 <改訂後> 上記に加え、EUの試験法を追加した。	P2 2. 国際的にもしくは化審法上認められた試験法等

○改訂の背景等

以下のEUの試験法を追加した。

融点：EU Method A.1 (Melting/Freezing Temperature)

沸点：EU Method A.2 (Boiling Temperature)

蒸気圧：EU Method A.4 (Vapour Pressure)

水に対する溶解度：EU Method A.6 (Water Solubility)

Koc：EU Method C.19 (Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on Sewage Sludge Using High Performance Liquid Chromatography)

logPow：EU Method A.8 (Partition Coefficient)

生分解性：EU Method C.4 (Determination of Ready Biodegradability)

BCF：EU Method C.13 (Bioconcentration:Flow-Through Fish Test)

3. 推計手法について	該当箇所
<現行> ヘンリー係数及びBCFについて、実測データが得られない場合は複数の推計手法を適用し、採用値を決定する。 <改訂後> 他の性状項目と同様に、評価Ⅰの段階では推計手法は一種類(EPI Suite)とする。	P6 図表 2 4.7 ヘンリー係数 4.10 生物濃縮性

○改訂の背景等

評価Ⅱ以降に推計値を採用する場合は、複数手法による推計を実施し、クロスチェック、証拠の重み付けアプローチを用いて、採用値を決定する。

4. 同一の信頼性ランクのデータが複数ある場合のデータの決定方法 (BCFを除く)	該当箇所
<p><現行> 複数データの算術平均値を算出し、各データの算術平均値が一定の範囲内の場合、その算術平均値を採用。一定範囲を超える場合は範囲外のデータを除外して求めた算術平均値を採用。</p> <p><改訂後> 複数データの中央値を採用する。(BCFの場合は最大値)</p>	P9 4.1 キースタディ等の選定に使用する性状データ全般(BCFを除く)に係る共通ルール

○改訂の背景等

複数データの分布が、非対象でどちらか（大きい方、または小さい方）にゆがんでいる場合、算術平均値は、数は少ないが値が大きいデータの影響を受けるため、分布の代表値として適当ではない。むしろ分布の中心という意味で中央値のほうが望ましいと考えられるため¹。

<具体例>

(現行) A という化学物質の蒸気圧について、100Pa、100Pa、100Pa、200Pa、300Pa、400Pa、1600Pa(それぞれランク「2B」、20°Cに温度補正後)というデータがある場合。

→ 7つのデータの算術平均値を算出する。算術平均値 400Pa の「±50%」の範囲外である、「100Pa」、「1600Pa」というデータを除き、残り3つのデータの算術平均値 (300Pa) を採用値とする。

(改訂後) 7つのデータの中央値(200Pa)を採用値とする。

¹ 基礎統計学 I 統計学入門 (東京大学出版)

5. 圧力記載のない沸点データの扱いについて	該当箇所
<p><現行> 圧力記載のあるデータを優先する。圧力記載のあるデータがない場合には、圧力記載のないデータを標準圧力におけるデータとみなして採用する場合がある。</p> <p><改訂後> 原則として、以下の優先順位とする。</p> <ol style="list-style-type: none"> ① 標準圧力で測定された値 ② 標準圧力以外で測定された値(標準圧力に補正して用いる) ③ 圧力記載のない値(標準圧力における値とみなす) ④ 推計値(EPI Suite) 	P10 4.3 沸点

○改訂の背景等

収集した沸点データには、標準圧力で測定されたデータ、標準圧力以外で測定されたデータ、測定条件の記載のないデータが混在していたため(図1参照)、圧力記載のあるデータ(特に標準圧力のデータ)を優先させるよう、ルールを明確化した。

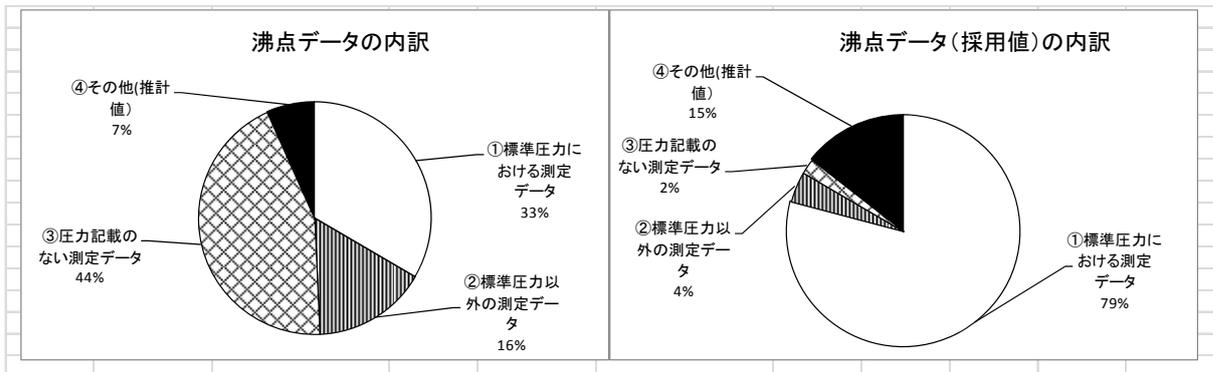


図1 優先評価化学物質の沸点データの内訳

6. 温度記載のない蒸気圧、水に対する溶解度データの扱いについて	該当箇所
<p><現行> 温度記載のあるデータを優先する。温度記載のあるデータがない場合には、温度記載のないデータを 20°Cにおけるデータでとみなし、採用する場合がある。</p> <p><改訂後> 原則として、以下の優先順位。20°C以外のデータは 20°Cに補正して用いる。</p> <ol style="list-style-type: none"> ① 20~25°Cで測定された値 ② 10~30°Cで測定された値 ③ ①、②以外の温度で測定された値 ④ 測定温度の記載がない値 (20°Cにおける値とみなす) ⑤ 推計値 (EPI Suite) 	p11~13 4.4 蒸気圧 4.5 水に対する溶解度

○改訂の背景等

蒸気圧及び水溶解度は、測定温度によって値が大きく変わることが予想される。収集した蒸気圧、水溶解度のデータには、常温付近で測定されたデータ、常温以外で測定されたデータ、測定条件の記載のないデータが混在していたため (図 2、図 3 参照)、温度記載のあるデータ (特に常温付近のデータ) を優先させるよう、ルールを明確化した。

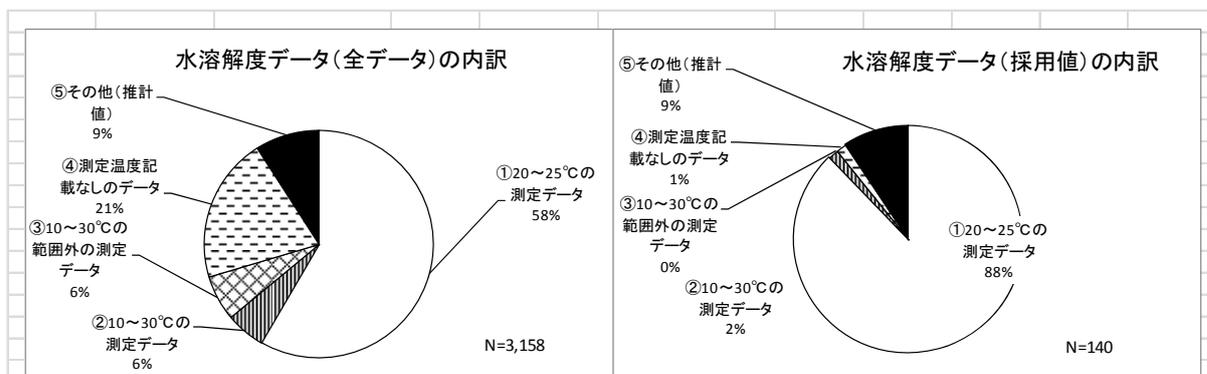


図 2 優先評価化学物質の水溶解度データの内訳

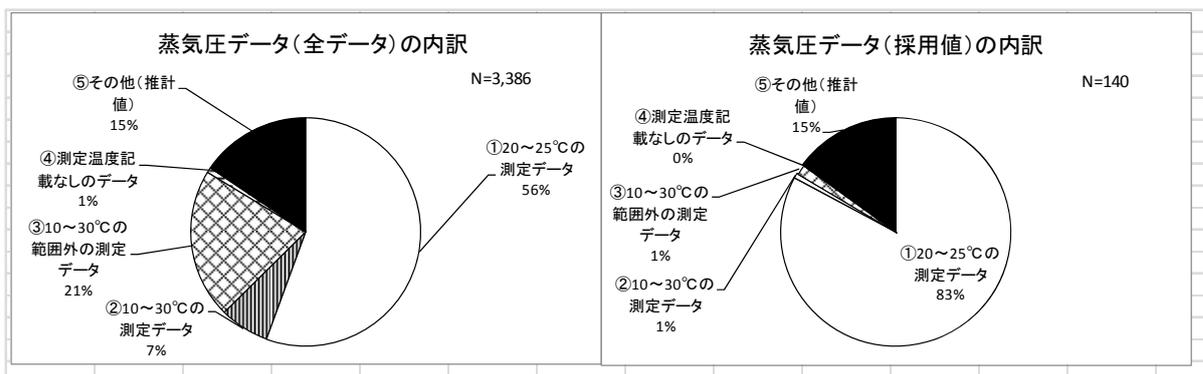


図3 優先評価化学物質の蒸気圧データの内訳

7. 解離定数 (pKa)について	該当箇所
<p><現行></p> <p>pKaは評価Ⅰまでの情報収集の対象であり、実測値、推計値データを収集し、信頼性ランクを付与後、信頼性の高いデータより採用値を決定する。</p> <p><改訂後></p> <p>項目全体を削除</p>	<p>解離定数 (pKa)</p>

○改訂の背景等

解離性物質についてpKaを考慮した暴露評価手法は現在検討中であり、評価Ⅰの段階ではpKaを評価に用いていない。評価Ⅱ以降で、改めてデータを収集し、採用値を決定する。

8. logPowの試験法の適用範囲の確認について	該当箇所
<p><現行></p> <p>信頼性ランク「1」に該当するデータが複数ある場合は、「$-2.0 < \log \text{Pow} \leq 4.0$」のときはフラスコ振とう法、「$4.0 < \log \text{Pow} \leq 6.0$」のときはHPLC法による値を優先</p> <p><改訂後></p> <p>該当箇所の記載を削除</p>	<p>P15</p> <p>4.8</p>

○改訂の背景等

試験法とその適用範囲のデータであるかの確認は、評価Ⅱ以降の精査の段階で確認することとし、評価Ⅰでは実施しない。これは他の性状項目についても、同様とする。