

「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」

新旧対比

現行	改訂第1版(案)
<p>はじめに</p> <p>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。</p>	<p>はじめに</p> <p>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。)を行った。平成23年度には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、引き続き優先評価化学物質を対象にリスク評価を実施している。</p>
<p>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。</p> <p>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、生物濃縮性に関するデータである。</p>	<p>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、信頼性評価とスクリーニング評価等で用いるデータの選定ルールについて規定する。</p> <p>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、ヘンリー係数に限る。)、生分解性、生物濃縮性に係るデータである。</p>
<p>これらの性状データの情報源は次の(ア)～(ウ)に大別される。</p> <p>(ア) 化審法上のデータ²</p> <p>(イ) 上記(ア)以外の文献情報等のデータ</p> <p>(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。</p>	<p>これらの性状データの情報源は以下の(ア)～(ウ)に大別される。</p> <p>(ア) 化審法上のデータ¹</p> <p>(イ) 上記(ア)以外の文献情報等のデータ</p> <p>(ウ) 推計(2.2参照)による定量的データ((ア)、(イ)を除く。)</p>
<p>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。)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、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を設定する。</p>	<p>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これらの中から採用するデータの選定は、審査・判定と同等に行うことが理想的である。しかしながら、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及び採用値の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困難である。そこで、円滑に信頼性評価やデータ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格付けする基準(以下、「信頼性基準」という。)、信頼性の格付けを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。)及びスクリーニング評価等に用いるデータを選定するルール(以下「キースタディ等の選定ルール」という。)を定める。そのルールに従い(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等の選定ルールを設定する。</p>

現行	改訂第1版(案)
	<p>改訂履歴</p> <p>平成23年9月15日 公表 平成24年7月25日 補足説明資料公表² 平成26年〇月〇日 改訂第1版公表</p>
<p>脚注</p> <p>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。</p> <p>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</p>	<p>脚注</p> <p>1 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がある。</p> <p>2 http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/infomation/ra_12072502.html</p>
	目次
<p>1. 性状データに関する選定基準の考え方</p> <p>1.1 信頼性ランクと使用可否基準</p> <p>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（信頼性ランク4）」の4つの信頼性ランクに分類する。</p> <p>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）を参考に整理したものであり、</p> <p>(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るか</p> <p>(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るデータであるか</p> <p>の2つの観点から分類している（表1）。</p> <p>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。</p> <p>信頼性ランク「3」に該当する性状データは、使用しない。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>（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以降に使用する場合には、精査等を行うこととする。</p>	<p>1. 性状データの信頼性評価等の考え方</p> <p>1.1 信頼性評価・信頼性基準・信頼性ランク</p> <p>性状データの出自（試験方法や出典等）によってデータの信頼性を格付けすることを「信頼性評価」といい、格付けの基準を「信頼性基準」、格付けの区分を「信頼性ランク」と呼ぶ。</p> <p>ここでは、図表1に示す信頼性ランク「1」から「4」までの4区分の信頼性ランクと信頼性基準を設定した。これらは、OECDの「化学物質点検マニュアル」における信頼性の考え方（参考1）、「Japan チャレンジスポンサーマニュアル³」における信頼性ランク分類の目安（参考2）を参考に整理したものであり、以下の二つの観点から分類している。</p> <p>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るか。</p> <p>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るデータであるか。</p> <p>さらに、同一の信頼性ランクの中での序列を明確にするため、A、B、Cの細区分を設定した。同一の信頼性ランクの中では、Aが最もランクが高く、次いでB、Cの順になる。</p> <p>脚注</p> <p>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）</p> <p>1.2 使用可否基準</p> <p>信頼性評価に基づき、スクリーニング評価等に用いる性状データの使用の可否を判断する基準を「使用可否基準」という。信頼性ランクごとの使用可否基準は以下のとおりとする。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 信頼性ランク「1」又は信頼性ランク「2」に該当する性状データ：原則、使用可 ・ 信頼性ランク「3」に該当する性状データ：使用不可 ・ 信頼性ランク「4」に該当する性状データ：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」に該当する性状データを暫定的に使用。

現行	改訂第1版(案)
<p>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」の「使用可否基準」を参照。</p> <p>【信頼性ランク1(信頼性あり(制限なし))】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・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法(参考3)によるものでGLP準拠のもの(信頼性ランク1A)。 ・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のデータを採用する。)(信頼性ランク1A)。 ・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1B)。 ・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。 <p>【信頼性ランク2(信頼性あり(制限付き))】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・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データ(信頼性ランク2A)。 ・「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(信頼性ランク2B)。 ・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2C)。 <p>【信頼性ランク3(信頼性なし)】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・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ータ。 <p>【信頼性ランク4(評価不能)】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・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。 	<p>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しも担保されていない場合があり得る。性状データ選定に係る全体の流れの中で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。</p> <p>性状データごとの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等の選定ルール」の「使用可否基準」に記載している。</p>

現行		改訂第1版(案)																																																																	
<p>表1 信頼性ランクと使用可否基準</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th rowspan="2">使用可否基準</th> <th rowspan="2">信頼性ランク</th> <th colspan="2">信頼性を評価する観点</th> </tr> <tr> <th>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</th> <th>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</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td rowspan="5">原則使用可</td> <td rowspan="2">信頼性あり</td> <td>1A</td> <td>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。</td> </tr> <tr> <td>1B</td> <td>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 準拠でないもの又は、不明なもの。</td> </tr> <tr> <td rowspan="3">制限付き</td> <td>2A</td> <td>—</td> <td>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</td> </tr> <tr> <td>2B</td> <td>—</td> <td>「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</td> </tr> <tr> <td>2C</td> <td>—</td> <td>適用範囲の推定方法 (2.2 参照) による推定値</td> </tr> <tr> <td>信頼性なし</td> <td>3</td> <td>—</td> <td>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</td> </tr> <tr> <td>原則使用不可</td> <td>評価不能</td> <td>4</td> <td>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 2A か 3 かの判断を行うことができないデータ。</td> </tr> </tbody> </table>		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。	1B	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 準拠でないもの又は、不明なもの。	制限付き	2A	—	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	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 2A か 3 かの判断を行うことができないデータ。	<p>図表1 信頼性ランク、信頼性基準及び使用可否基準</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th rowspan="2">使用可否基準</th> <th rowspan="2">信頼性ランク</th> <th colspan="2">信頼性基準 (信頼性を評価する観点)</th> </tr> <tr> <th>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</th> <th>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</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td rowspan="5">原則使用可</td> <td rowspan="2">信頼性あり</td> <td>1A</td> <td>制限なし 化審法通知⁹⁾の試験法又は OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法 (2.1 参照) によるもので GLP¹⁰⁾準拠のもの</td> </tr> <tr> <td>1B</td> <td>制限なし 化審法通知の試験法又は OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法 (2.1 参照) によるもので GLP 準拠でないもの又は、不明なもの</td> </tr> <tr> <td rowspan="3">制限付き</td> <td>2A</td> <td>—</td> <td>・OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法 (2.1 参照) と完全に一致していないが、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データ ・OECD-HPV プログラムの SIAR のキースタディのうち測定値データ (Reliability2 の記載があるデータ又は Reliability の記載がないデータ)</td> </tr> <tr> <td>2B</td> <td>—</td> <td>「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</td> </tr> <tr> <td>2C</td> <td>—</td> <td>適用範囲の推定方法 (2.2 参照) による推計値</td> </tr> <tr> <td>信頼性なし</td> <td>3</td> <td>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</td> <td>—</td> </tr> <tr> <td>評価不能</td> <td>4A</td> <td>試験条件及び情報源等が不明な測定値データ</td> <td>—</td> </tr> <tr> <td></td> <td>4C</td> <td>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</td> <td>—</td> </tr> </tbody> </table>		使用可否基準	信頼性ランク	信頼性基準 (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 化審法通知 ⁹⁾ の試験法又は OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法 (2.1 参照) によるもので GLP ¹⁰⁾ 準拠のもの	1B	制限なし 化審法通知の試験法又は OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法 (2.1 参照) によるもので GLP 準拠でないもの又は、不明なもの	制限付き	2A	—	・OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法 (2.1 参照) と完全に一致していないが、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データ ・OECD-HPV プログラムの SIAR のキースタディのうち測定値データ (Reliability2 の記載があるデータ又は Reliability の記載がないデータ)	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) による推計値	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	—	評価不能	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、又は推計条件等が不明な推計値	—
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。																																																																
		1B	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 準拠でないもの又は、不明なもの。																																																																
	制限付き	2A	—	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																																																															
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 2A か 3 かの判断を行うことができないデータ。																																																																
使用可否基準	信頼性ランク	信頼性基準 (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 化審法通知 ⁹⁾ の試験法又は OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法 (2.1 参照) によるもので GLP ¹⁰⁾ 準拠のもの																																																																
		1B	制限なし 化審法通知の試験法又は OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法 (2.1 参照) によるもので GLP 準拠でないもの又は、不明なもの																																																																
	制限付き	2A	—	・OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法 (2.1 参照) と完全に一致していないが、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データ ・OECD-HPV プログラムの SIAR のキースタディのうち測定値データ (Reliability2 の記載があるデータ又は Reliability の記載がないデータ)																																																															
		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) による推計値																																																															
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	—																																																																
評価不能	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、又は推計条件等が不明な推計値	—																																																																
<p>脚注</p> <p>4 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)</p> <p>5 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)</p>		<p>*信頼性ランク 1,2 に該当するデータがない場合にのみ暫定的に使用</p> <p>1) 「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)</p> <p>2) Good Laboratory Practice : 優良試験所基準</p> <p>3) 現在の OECD Cooperative Chemicals Assessment Programme</p> <p>4) SIDS Initial Assessment Report</p>																																																																	
<p>1.2 キースタディ選定ルール</p> <p>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)。</p> <p>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しを行う。</p>		<p>1.3 キースタディ等の選定ルール</p> <p>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」に該当するものの中から信頼性ランクの高いデータを優先的に選択する (信頼性ランクは 1A が最も高く、次いで 1B、2A、2B、2C の順になる)。最も高い信頼性ランクのデータが複数ある場合は、性状データごとに設定するキースタディ等の選定ルールによって採用する値を決定する⁴ (4.性状の項目別の使用可否基準とキースタディ等の選定ルールの「キースタディ等の選定ルール」を参照)。</p> <p>また、初回のリスク評価 (一次) 評価 I 終了以降は、性状データについて総合的な観点による精査を行い、必要に応じてキースタディ等の見直しを行う。</p>																																																																	

現行	改訂第1版(案)
<p>図1 物性データに関する概念的選定基準</p>	
<p>脚注 6 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。</p>	<p>脚注 4 測定値が得られず、かつ、推計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。</p>
<p>2. 国際的に、もしくは化審法上認められた試験法等</p> <p>2.1 試験法 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。 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。</p>	<p>2. 国際的にもしくは化審法上認められた試験法等</p> <p>2.1 試験法 化審法試験通知にある試験法、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等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。 なお、以下に挙げる試験法については 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。</p>
<p>(1) 融点</p> <ol style="list-style-type: none"> ① OECD TG 102 (Melting Point/ Melting Rang) ② JIS K 0064 (化学製品の融点及び溶融範囲測定方法) ③ JIS K 0065 (化学製品の凝固点測定方法) ④ ISO 1392 (Method for the determination of the crystallizing point) ⑤ ISO 2207 (Petroleum waxes - Determination of congealing point) ⑥ ISO 3016 (Petroleum oils - Determination of pour point) ⑦ EPA OPPTS 830.7200 (Melting Point / Melting Range) 	<p>(1) 融点</p> <ol style="list-style-type: none"> ① OECD TG 102 (Melting Point) ② JIS K 0064 (化学製品の融点及び溶融範囲測定方法) ③ JIS K 0065 (化学製品の凝固点測定方法) ④ ISO 1392 (Method for the determination of the crystallizing point) ⑤ ISO 2207 (Petroleum waxes - Determination of congealing point) ⑥ ISO 3016 (Petroleum oils - Determination of pour point) ⑦ EPA OPPTS 830.7200 (Melting Point / Melting Range) ⑧ EU Method A.1 (Melting/Freezing Temperature)

現行	改訂第1版(案)
<p>(2) 沸点</p> <ul style="list-style-type: none"> ① OECD TG 103 (Boiling point/boiling range) ② JIS K 0066 (化学製品の蒸留試験方法) ③ ISO 918 (Volatile organic liquids for industrial use – Determination of distillation characteristics) ④ ISO 3924 (Petroleum products – Determination of boiling range distribution – Gas chromatography method) ⑤ ISO 3405:1988 (Petroleum products – Determination of distillation characteristics) ⑥ EPA OPPTS 830.7220 (Boiling Point / Boiling Range) 	<p>(2) 沸点</p> <ul style="list-style-type: none"> ① OECD TG 103 (Boiling point) ② JIS K 0066 (化学製品の蒸留試験方法) ③ ISO 918 (Volatile organic liquids for industrial use - Determination of distillation characteristics) ④ ISO 3924 (Petroleum products - Determination of boiling range distribution - Gas chromatography method) ⑤ ISO 3405:1988 (Petroleum products - Determination of distillation characteristics) ⑥ EPA OPPTS 830.7220 (Boiling Point / Boiling Range) ⑦ EU Method A.2 (Boiling Temperature)
<p>(3) 蒸気圧</p> <ul style="list-style-type: none"> ① OECD TG 104 (Vapour Pressure Curve) 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) 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) ④ ISO 3007 (Petroleum products and crude petroleum – Determination of vapor pressure – Reid method) ⑤ EPA OPPTS 830.7950 (Vapor Pressure) 	<p>(3) 蒸気圧</p> <ul style="list-style-type: none"> ① OECD TG 104 (Vapour Pressure) 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) 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) ④ ISO 3007 (Petroleum products and crude petroleum – Determination of vapor pressure – Reid method) ⑤ EPA OPPTS 830.7950 (Vapor Pressure) ⑥ EU Method A.4 (Vapour Pressure)
<p>(4) 水に対する溶解度</p> <ul style="list-style-type: none"> ① OECD TG 105 (Water Solubility) ② EPA OPPTS 830.7840 (Water Solubility) ③ EPA OPPTS 830.7860 (Water Solubility Generator Column Method) 	<p>(4) 水に対する溶解度</p> <ul style="list-style-type: none"> ① OECD TG 105 (Water Solubility) ② EPA OPPTS 830.7840 (Water Solubility) ③ EPA OPPTS 830.7860 (Water Solubility Generator Column Method) ④ EU Method A.6 (Water Solubility)
<p>(5) 有機炭素補正土壌吸着係数</p> <ul style="list-style-type: none"> ① OECD TG 121 (Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on Sewage Sludge using High Performance Liquid Chromatography (HPLC)) ② OECD TG 106 (Adsorption -Desorption Using a Batch Equilibrium Method) ③ EPA OPPTS 835.1110 (Activated Sludge Sorption Isotherm) ④ EPA OPPTS 835.1220 (Sediment and Soil Adsorption / Desorption Isotherm) ⑤ ISO 18747 (Water quality: adsorption of substances on activated sludge-batch test using specific analytical method.) 	<p>(5) 有機炭素補正土壌吸着係数</p> <ul style="list-style-type: none"> ① OECD TG 121 (Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on Sewage Sludge using High Performance Liquid Chromatography (HPLC)) ② OECD TG 106 (Adsorption -Desorption Using a Batch Equilibrium Method) ③ EPA OPPTS 835.1110 (Activated Sludge Sorption Isotherm) ④ EPA OPPTS 835.1220 (Sediment and Soil Adsorption / Desorption Isotherm) ⑤ ISO 18749 (Water quality: adsorption of substances on activated sludge-batch test using specific analytical method.) ⑥ EU Method C.19 (Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on Sewage Sludge Using High Performance Liquid Chromatography)
<p>(6) 解離定数 (酸解離定数) OECD TG 112 (Dissociation Constants in Water)</p>	<p>削除</p>

現行	改訂第1版(案)
<p>(7) 1-オクタノールと水との間の分配係数</p> <p>① OECD TG 107 (Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method)</p> <p>② OECD TG 117 (Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method)</p> <p>③ OECD TG 123 (Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method)</p> <p>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)</p> <p>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)</p> <p>⑥ EPA OPPTS 830.7550 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Shake Flask Method)</p> <p>⑦ EPA OPPTS 830.7560 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Generator Column Method)</p> <p>⑧ EPA OPPTS 830.7570 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Estimation By Liquid Chromatography)</p>	<p>(6) 1-オクタノールと水との間の分配係数</p> <p>① OECD TG 107 (Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method)</p> <p>② OECD TG 117 (Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method)</p> <p>③ OECD TG 123 (Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method)</p> <p>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)</p> <p>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)</p> <p>⑥ EPA OPPTS 830.7550 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Shake Flask Method)</p> <p>⑦ EPA OPPTS 830.7560 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Generator Column Method)</p> <p>⑧ EPA OPPTS 830.7570 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Estimation By Liquid Chromatography)</p> <p>⑨ EU Method A.8 (Partition Coefficient)</p>
<p>(8) 生分解性</p> <p>① OECD TG 301A (DOC Die-Away)</p> <p>② OECD TG 301 B (CO₂ Evolution (Modified Sturm Test))</p> <p>③ OECD TG 301C (MITI (I) (Ministry of International Trade and Industry, Japan))</p> <p>④ OECD TG 301D (Closed Bottle)</p> <p>⑤ OECD TG 301E (Modified OECD Screening)</p> <p>⑥ OECD TG 301F (Manometric Respirometry)</p> <p>⑦ OECD TG 310 (Ready Biodegradability – CO₂ in sealed vessels (Headspace Test))</p>	<p>(7) 生分解性</p> <p>① OECD TG 301A (DOC Die-Away)</p> <p>② OECD TG 301 B (CO₂ Evolution (Modified Sturm Test))</p> <p>③ OECD TG 301C (MITI (I) (Ministry of International Trade and Industry, Japan))</p> <p>④ OECD TG 301D (Closed Bottle)</p> <p>⑤ OECD TG 301E (Modified OECD Screening)</p> <p>⑥ OECD TG 301F (Manometric Respirometry)</p> <p>⑦ OECD TG 302C (Inherent Biodegradability: Modified MITI Test (II))</p> <p>⑧ OECD TG 310 (Ready Biodegradability – CO₂ in sealed vessels (Headspace Test))</p> <p>⑨ EU Method C.4 (Determination of Ready Biodegradability)</p>
<p>(9) 生物濃縮性⁶</p> <p>① OECD TG 305 (Bioconcentration: Flow-through Fish Test)</p> <p>② OECD TG 305 A (Bioaccumulation: Sequential Static Fish Test)</p> <p>③ OECD TG 305 B (Bioaccumulation: Semi-static Fish Test)</p> <p>④ OECD TG 305 C (Bioaccumulation: Test for the Degree of Bioconcentration in Fish)</p> <p>⑤ OECD TG 305 D (Bioaccumulation: Static Fish Test)</p> <p>⑥ OECD TG 305 E (Bioaccumulation: Flow-through Fish Test)</p> <p>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)</p> <p>⑧ EPA OPPTS 850.1730 (Fish Bioconcentration Test)</p>	<p>(8) 生物濃縮性⁵</p> <p>① OECD TG 305 (Bioaccumulation in Fish: Aqueous and Dietary Exposure)</p> <p>② OECD TG 305 A (Bioaccumulation: Sequential Static Fish Test)</p> <p>③ OECD TG 305 B (Bioaccumulation: Semi-static Fish Test)</p> <p>④ OECD TG 305 C (Bioaccumulation: Test for the Degree of Bioconcentration in Fish)</p> <p>⑤ OECD TG 305 D (Bioaccumulation: Static Fish Test)</p> <p>⑥ OECD TG 305 E (Bioaccumulation: Flow-through Fish Test)</p> <p>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)</p> <p>⑧ EPA OPPTS 850.1730 (Fish Bioconcentration Test)</p> <p>⑨ EU Method C.13 (Bioconcentration: Flow-Through Fish Test)</p>
<p>脚注</p> <p>5 OECD TG 305 A～Eは、1996年に OECD TG 305 に統合された。</p>	<p>脚注</p> <p>5 OECD TG 305 A～Eは、1996年に OECD TG 305 に統合された。</p>

現行	改訂第1版(案)
----	----------

2.2 推定方法

「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「2C」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、得られる推定値は、信頼性ランク「4」（信頼性不明）とする⁷。
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に示す。

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 ²⁷	
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) ²⁸	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) ²⁹	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) ³⁰	SMILES 又は CAS 番号、Log Pow		同上、4.10 参照
	濃縮性子測システム(CERIモデル) ³⁴	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) ⁵	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：変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) ³⁶	SMILES 又は CAS 番号	水に対する溶解度 ≥1 mol/L (4.6 参照) ³⁸	
	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 ³⁹	

- ※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
- ※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
- ※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
- ※4：トレーニングセットの適用範囲：記載なし
- ※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
- ※6：トレーニングセットの適用範囲：分子量 (MW) =26~451
- ※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

改訂第1版(案)

2.2 推計方法

OECD の「化学物質点検マニュアル」において、SIDS⁶ 項目に対して推計値の使用を認めており、本選定基準においても、図表2に示す推計方法による推計値を信頼性ランク「2C」のデータ（推計するために用いた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とする。なお、推計するために用いたデータに信頼性ランク「2C」以下のデータが含まれる場合、得られる推計値は信頼性ランク「4C」（評価不能）とする。

図表2 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計方法

項目	推計方法	推計に必要な項目	備考	
融点	MPBPVP(EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号	・推計する際は、最新バージョンのプログラムを用いることとする。 ・EPI Suiteの適用範囲は、原則として有機化学物質。各項目により適用範囲は異なる ¹⁾ 。	
沸点	MPBPVP(EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号		
蒸気圧	MPBPVP(EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号、融点、沸点		
水に対する溶解度	WSKOW(EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号、logPow、融点		
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	KOCWIN(EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号、logPow		
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	KOWWIN(EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号		
生物濃縮係数 (BCF)	BCFBAF(EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号、logPow		
ヘンリー係数	HENRYWIN(EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号		
				HENRYWINの適用が不可能な場合 ²⁾ は、計算式 H=VP/(WS/MW)を用いて推計する。H:ヘンリー係数、MW:分子量、WS:水に対する溶解度、VP:蒸気圧

- 1) EPI Suite™ User's Guide より
- 2) HENRYWIN では、トレーニングセットに含まれる結合を有する化学物質のみ推計可能である。

現行	改訂第1版(案)
<p>用(2011年3月3日現在不通)</p> <p>※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</p> <p>※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</p> <p>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。</p> <p>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。</p>	<p>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。</p>
<p>脚注</p> <p>6 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。</p>	<p>脚注</p> <p>6 Screening Information Data Set: スクリーニング用情報データセット。</p>
<p>3. 信頼性の定まった情報源</p> <p>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。</p>	<p>3. 国が既知見を収集する情報源の範囲</p> <p>性状データに関して、国が既知見を収集する情報源の範囲は原則、「3.1 信頼性が定まった情報源」とする。</p> <p>上記以外の情報源による既知見を国が入手した場合は「4. 性状の項目別の使用可否基準とケーススタディ等の選定ルール」に従い、評価に用いるデータの選定を行う。</p> <p>また、以下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以降に使用する場合には、精査等を行うこととする。</p> <p>3.1 信頼性の定まった情報源</p> <p>本選定基準では、(1) から(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、必要に応じ見直しを行う。</p>

現行	改訂第1版(案)
<p>3.1 信頼性が高いと認められる情報源</p> <p>「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。</p> <p>本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認を要さず⁸信頼性ありと判断する。</p> <p>以下に掲げる情報源のうち、OECDのSIDS (Screening Information Data Set)においてSIARに使用されたデータは信頼性ランク「1A」に分類される。その他の情報源は、表1に示す基準では、信頼性ランク「2B」と判断されるが、2.1に記載した試験法にて実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。</p> <ul style="list-style-type: none"> • OECD : SIDS レポート • CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th, CRC-Press, 2009 • Hazardous Substances Data Bank (HSDB) • Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007 • SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009 • The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006 • The IUPAC Solubility Data Series • Illustrated Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, CRC-Press, 1997 • Lange's Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 2005 	<p>(1) 信頼性が高いと認められる情報源</p> <p>「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。</p> <p>本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」、「REACHの技術ガイダンス」⁷、OECDの「化学物質点検マニュアル」⁸に取り上げられており、ピアレビューがな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認を要さず⁹「信頼性あり」と判断する。</p> <p>なお、下記の情報源について改訂版等が出版される等、情報が更新された場合には最新版を用いるのが望ましい。</p> <ul style="list-style-type: none"> • CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC-Press, • Hazardous Substances Data Bank (HSDB), U.S.National Library of Medicine • Hawley's Condensed Chemical Dictionary, John Wiley & Sons • SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation • The Merck Index, Merck & Co • The IUPAC Solubility Data Series, U.S.National Institute of Standards and Technology • Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, CRC-Press, 1997
<p>脚注</p> <p>7 「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。</p>	<p>脚注</p> <p>7 Guidance on information requirements and chemical safety assessment, Chapter R.7a: Endpoint specific guidance, European Chemicals Agency</p> <p>8 Manual for the Assessment of Chemicals, Chapter 3. Data Evaluation, OECD (2005)</p> <p>9 OECDの「化学物質点検マニュアル」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。</p>
<p>3.2 専門家によるレビューを経ている情報源</p> <p>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、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信頼性ありと判断する。</p> <p>表1に示す基準では、信頼性ランク「2B」と判断されが、2.1に記載した試験法にて実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。</p> <p>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、優先順位はキースタディ>Reliability 1>Reliability 2とする。</p> <ul style="list-style-type: none"> • US/HPV チャレンジプログラム • Japan チャレンジプログラム 	<p>(2) 専門家によるレビューを経ている情報源</p> <p>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、Reliabilityの記載があるものはReliability 1及び2のデータ、Reliability 3及びReliability 4のデータは用いない)については、専門家によるレビューを経ている等の作成経緯を考慮し、原著等での確認を要さず原則として「信頼性あり」と判断する。</p> <p>以下に掲げる情報源のうち、OECDのSIDS Initial Assessment Reportにおけるキースタディのうち、「Reliability 1」の測定値データは信頼性ランク「1A」に分類される。その他の情報源における測定値は、図表1に示す基準では、信頼性ランク「2B」と判断されるが、2.1に記載した試験法にて実施されたことが確認できれば、信頼性ランク「1」に分類される。</p> <ul style="list-style-type: none"> • OECD : SIDS Initial Assessment Report • US/HPV チャレンジプログラム¹⁰

現行	改訂第1版(案)
<p>・(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構・(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質有害性評価書」</p> <ul style="list-style-type: none"> ・環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」 ・WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」 ・WHO/IPCS:「国際簡潔評価文書(CICAD)」 ・ATSDR(米国毒性物質疾病登録局):「Toxicological Profile」 ・EU ECB(European Chemicals Bureau):「リスク評価書(EU Risk Assessment Report)」 <p>(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以降に使用する場合には、精査等を行うこととする。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・Japan チャレンジプログラム¹⁰ ・既存化学物質安全性点検報告書(化審法データベース: J-CHECK) ・(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構・(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質有害性評価書」 ・環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」 ・WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」 ・WHO/IPCS:「国際簡潔評価文書(CICAD)」 ・ATSDR(米国毒性物質疾病登録局):「Toxicological Profile」 ・EU ECB(European Chemicals Bureau):「リスク評価書(EU Risk Assessment Report)」
	<p>脚注</p> <p>10 当該プログラムによるデータで、専門家のレビューを受ける前のデータについては、データの試験法や情報源に基づいて信頼性評価を行うものとする。</p>
<p>3.3 専門家が信頼性ありと認めた情報源</p> <p>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さず信頼性ありと判断する。表1の基準では、信頼性ランク「2B」と判断される。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・Sigma-Aldrich 試薬カタログ <p>(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以降に使用する場合には、精査等を行うこととする。</p>	<p>(3) 専門家が信頼性ありと認めた情報源</p> <p>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さず「信頼性あり」と判断する。図表1の基準では、信頼性ランク「2B」と判断される。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・Sigma-Aldrich 試薬カタログ
	<p>3.2 必要に応じて追加する情報源</p> <p>「3.1 信頼性の定まった情報源」からデータが得られず、推計も行えなかった場合等、必要に応じて以下に例示する情報源を収集対象とする。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・EU ECHA(European Chemicals Agency): Information on Registered Substances ・EU ECB(European Chemicals Bureau): International Uniform Chemical Information Database(IUCLID) <p>ただし、これらの情報源から得られた性状データは、データの試験法や情報源に基づいて信頼性評価を行うものとする。</p>

現行	改訂第1版(案)
	<p data-bbox="810 304 1501 331">4. 性状の項目別の使用可否基準とキースタディ等の選定ルール</p> <p data-bbox="810 360 1501 450">スクリーニング評価等で用いる性状データについては、以下の2種類があり、特に区別しない場合には、「キースタディ等」という。</p> <p data-bbox="826 488 1501 645">「採用値」：スクリーニング評価等に実際に使用する値。最も高い信頼性ランクのデータが単一の場合はその値であり、複数場合は、複数データの中央値となる。なお、生物濃縮性 (BCF)では最大値を採用する(4.10 参照)</p> <p data-bbox="826 683 1501 898">「キースタディ」：「採用値」の元となった測定データ等。数値だけでなく当該データに関する属性(測定温度や試験法等)も含む。最も高い信頼性ランクのデータが単一の場合はその測定データ等である。奇数個の複数データがある場合は中央値に等しい測定データ等となり、偶数個の複数データがある場合は中央値に近い二つの測定データ等となる。</p> <p data-bbox="810 949 1501 1032">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</p> <p data-bbox="810 1048 1501 1106">(1) 一つの性状項目について複数データがある場合の取り扱いについて</p> <p data-bbox="810 1113 1501 1202">同一の信頼性ランクのデータが複数ある場合¹¹には、それらの中央値を採用値とする。この場合、中央値に最も近いデータをキースタディとする。</p> <p data-bbox="810 1240 1501 1267">(2) 不等号等がついたデータの取り扱いについて</p> <p data-bbox="810 1274 1501 1458">収集する性状データは確定値が望ましいが、場合によっては確定値以外の数値データ(例：約300℃、$\geq 150^\circ\text{C}$等)が得られる場合があり、確定値と確定値以外(不等号等をついたデータ等)が混在する場合の優先順位は、確定値、「約」がついているデータ、範囲で示されているデータ、不等号等がついているデータの順とする。</p> <ol data-bbox="836 1496 1501 1939" style="list-style-type: none"> ① 同一の信頼性ランクのデータで確定値があれば、その値を優先してキースタディ等の選定に採用する。 ② 同一の信頼性ランクのデータで確定値がなく、「約」がついたデータがある場合、「約」を外した数値部分をキースタディ等の選定に採用する。 (例)「約300℃」の場合、「300℃」として採用する。 ③ データが範囲で示されている場合、その範囲の算術平均値をキースタディ等の選定に採用する。 (例)「30～45℃」と示されている場合、30℃と45℃の算術平均値37.5℃として採用する。 ④ 同一の信頼性ランクのデータで、不等号等がついたデータのみの場合、不等号等を外した数値部分をキースタディ等の選定に採用する。 (例)「$\geq 150^\circ\text{C}$」の場合、「150℃」として採用する。 <p data-bbox="836 1973 1501 2000">なお、4.2 以下に示す各性状項目における「キースタディ等の</p>

現行	改訂第1版(案)
	<p>選定ルール」で、個別にデータ選定の優先条件が示されている場合¹²は、その優先条件を優先する。</p> <p>(例) 蒸気圧の測定値で、以下の二つのデータがある場合、確定値は(b)のデータであるが、測定温度が 20℃である (a) のデータを優先して採用する。</p> <p>(a) 測定温度が 20℃で約 100 Pa (b) 測定温度が 10℃で 88 Pa</p> <p>(3) 信頼性ランク「4」の取り扱い</p> <p>原則として信頼性ランク「1」又は「2」に該当する定量的データを選択するが、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。</p> <p>信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する場合、測定値(信頼性ランク 4A)と推計値(信頼性ランク 4C)がある場合には測定値を優先する。</p>
	<p>脚注</p> <p>11 一つの情報源において単位換算値が複数記載されている場合は、いずれか一つを使用して中央値を求める。その際、融点と沸点は「℃」、蒸気圧は「Pa」、水溶解度は「mg/L」、KocとBCFは「L/kg」、ヘンリー係数は「Pa・m³/mol」等、単位を統一する。</p> <p>12 沸点、蒸気圧、水に対する溶解度等が該当する。</p>
<p>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</p> <p>4.1 融点</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <p>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、その旨を明示する。得られたデータが溶解範囲又は凝固範囲である場合は、その範囲の平均値を融点又は凝固点として扱う。</p> <p>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、その旨を明示する。</p> <p>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。</p>	<p>4.2 融点</p> <p>使用可否基準</p> <p>図表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。</p> <p>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、その旨を明示する。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、その旨を明示する。</p> <p>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。</p>

現行	改訂第1版(案)
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。</p> <ol style="list-style-type: none"> 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、それを採用する。 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、算術平均値の算出に用いた各データが算術平均値±10℃以内⁹である場合は算術平均値に最も近い測定値を選定する。算術平均値±10℃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つのデータの算術平均値を採用する。 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。 ④ MPBPWIN (EPI Suite) による融点の推定値を選定する。 	<p>キースタディ等の選定ルール</p> <p>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等を選定する。</p> <ol style="list-style-type: none"> ① 信頼性ランク「1」に該当するデータのうち、より信頼性が高いデータ(優先順位は、1A、1Bの順である。)を採用する。同一信頼性ランクのデータが複数ある場合には4.1(1)、(2)の基準で選択する。 ② 信頼性ランク「2」に該当するデータについても、①と同様に選定する。 ③ MPBPVP (EPI Suite) による融点の推計値 (Selected MPとして示される値¹³)を選定する(信頼性ランク2C)。 ④ 信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する場合、測定値(信頼性ランク4A)と推計値(信頼性ランク4C)がある場合には測定値を優先する。
<p>脚注</p> <p>11 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。</p>	<p>脚注</p> <p>13 MPBPVPでは、Selected MPとしてJobackの推計法とGold and Ogleの推計法の2種の推計法の平均値が示される</p>
<p>4.2 沸点</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合限り、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。</p>	<p>4.3 沸点</p> <p>使用可否基準</p> <p>図表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。</p> <p>信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合限り、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。</p>
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。</p> <p>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、標準圧力(101.3 kPa)における値に換算する¹⁰。</p> $BP' = BP + 0.00090 \times (273 + BP) \times (101.3 - \frac{P}{1000})$ <ol style="list-style-type: none"> ① 信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も信頼性が高い 	<p>キースタディ等の選定ルール</p> <p>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等を選定する。</p> <p>得られた沸点データが標準圧力(101.325 kPa)における値以外の場合には、(式1)により圧力補正を行い、標準圧力における値に補正する¹⁴。</p> $BP' = BP + 0.00090 \times (273.15 + BP) \times (101.325 - \frac{P}{1000}) \quad (\text{式 1})$ <p>BP:補正前沸点(℃) BP':補正後沸点(℃) P:測定時の圧力(Pa)</p> <ol style="list-style-type: none"> ① 信頼性ランク「1」に該当するデータのうち、標準圧力で測

現行	改訂第1版(案)
<p>いデータが1つであれば、それを採用する。</p> <p>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、以下のように選定する。</p> <p>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。</p> <p>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用いた各データが算術平均値$\pm 12.5^{\circ}\text{C}$以内¹¹である場合は算術平均値に最も近い測定値を選定する。(算術平均値$\pm 12.5^{\circ}\text{C}$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つのデータをキースタディとし、化学物質の沸点としては2つのデータの算術平均値を採用する。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>④ MPBPWIN (EPI Suite) による沸点の推定値を選定する。</p>	<p>定された、より信頼性が高いデータ(優先順位は、1A、1Bの順である。)を採用する。同一信頼性ランクのデータが複数ある場合には4.1(1)、(2)の基準で選択する。標準圧力で測定されたデータがない場合には、標準圧力以外で測定されたデータを(式1)により標準圧力に補正し、用いる。</p> <p>② 信頼性ランク「2」のデータについても①と同様に選定する。</p> <p>③ MPBPVP (EPI Suite) による沸点の推計値(信頼性ランク2C)を採用する。</p> <p>④ 信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する場合、測定値(信頼性ランク4A)と推計値(信頼性ランク4C)がある場合には測定値を優先する。ここでいうランク「4A」の測定値には、測定圧力の記載のないデータ及び「3.1 信頼性の定まった情報源」以外の情報源より収集したデータが含まれる。複数の4Aデータがある場合には、標準圧力におけるデータ、標準圧力以外で測定されたデータ、測定圧力記載なしのデータ(標準圧力における値とみなす)の優先順位とする。</p>
<p>脚注</p> <p>13 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)。</p> <p>14 REACHの技術ガイダンスでの測定値の推定精度$\pm 2.5\text{K}$を参考に設定。</p>	<p>脚注</p> <p>14 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。</p>
<p>4.3 蒸気圧</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <p>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。</p>	<p>4.4 蒸気圧</p> <p>使用可否基準</p> <p>図表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。</p> <p>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。</p>

現行	改訂第1版(案)
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。 温度記載のある蒸気圧は、20℃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。</p> $VP' = VP \times e^{\left\{ \frac{H_{0vapor}}{R} \times \left(\frac{1}{T+273} - \frac{1}{20+273} \right) \right\}}$ <p>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、それを採用する。</p> <p>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℃におけるデータを優先し、以下のように選定する。</p> <p>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。</p> <p>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。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。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は2つのデータの算術平均値を採用する。</p> <p>c. 20～25℃以外のデータが複数ある場合：20～25℃に温度が近いデータを採用する。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p>	<p>キースタディ等の選定ルール</p> <p>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等を選定する。 温度記載(20℃を除く)のあるデータは、(式2)により20℃における値に補正する¹⁵。</p> $VP' = VP \times \exp\left[\frac{H_{0vapor}}{R} \times \left(\frac{1}{T+273.15} - \frac{1}{20+273.15}\right)\right] \quad (\text{式 2})$ <p>VP：補正前蒸気圧 (Pa) VP'：補正後蒸気圧 (Pa) T：測定温度 (℃) R：気体定数 (8.314 Pa・m³/(mol・K)) H_{0vapor}：蒸発エンタルピー (5×10⁴ J/mol)</p> <p>① 信頼性ランク「1」に該当するデータのうち、より信頼性が高いデータ(優先順位は、1A、1Bの順である。)を採用する。同一信頼性ランクでは、温度20～25℃の試験法に従った処理の結果によるデータを優先して採用し、次いで温度10～30℃(20～25℃を除く)の試験法に従った処理の結果によるデータを採用する。その結果、該当するデータが複数ある場合には4.1(1)、(2)の基準で選択する。</p> <p>② 信頼性ランク「2」に該当するデータについて①と同様に選定する。</p> <p>③ MPBPVP (EPI Suite) による蒸気圧の推計値 (Selected VPとして表示された値)を採用値とする。このとき、先にキースタディ等の選定ルールに基づき決定された融点と沸点の採用値を用いる。その際に融点及び沸点の信頼性ランクがいずれも「2B」以上のとき、得られる蒸気圧の信頼性ランクは「2C」とする。それ以外の場合は信頼性ランク「4C」とする。</p> <p>④ 信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する場合、測定値(信頼性ランク4A)と推計値(信頼性ランク4C)がある場合には測定値を優先する。ここでいうランク「4A」の測定値には、温度が10～30℃の範囲外のデータ、温度の記載のないデータ及び「3.1 信頼性の定まった情報源」以外の情報源より収集したデータが含まれる。複数の4Aデータがある場合には、20～25℃の測定データ、10～30℃の測定データ、10～30℃の範囲外の測定データ、温度記載なしのデータ(20℃における値とみなす)の優先順位とする。</p>
<p>脚注</p> <p>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)。</p> <p>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。</p>	<p>脚注</p> <p>15 Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part II, Chapter 3, 2.3.2 Data for exposure models(ECB, 2003) の Equation (2)から引用。</p>

現行	改訂第1版(案)
<p>4.4 水に対する溶解度</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <p>信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合限り、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。</p>	<p>4.5 水に対する溶解度</p> <p>使用可否基準</p> <p>図表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¹⁶。</p> <p>信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合限り、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。</p>
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。</p> <p>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。</p> $WS' = WS \times e^{\left\{ \frac{H_{0solut}}{R} \times \left(\frac{1}{T+273} - \frac{1}{20+273} \right) \right\}}$ <p>「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限り、検出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。</p> <p>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、それを採用する。</p> <p>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℃における値を優先し、以下のように選定する。</p> <p>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。</p> <p>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。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。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解度としては2つのデータの算術平均値を採用する。</p> <p>c. 20～25℃以外のデータが複数ある場合：20～25℃に温度が近いデータを採用する。</p> <p>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。</p> <p>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。</p>	<p>キースタディ等の選定ルール</p> <p>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等を選定する。</p> <p>温度記載(20℃を除く)のあるデータは、(式3)により20℃における値に補正する¹⁷。</p> $WS' = WS \times \exp\left[\frac{H_{0solut}}{R} \times \left(\frac{1}{T+273.15} - \frac{1}{20+273.15}\right)\right] \quad (\text{式 3})$ <p>WS:補正前溶解度 (mg/L) WS':補正後溶解度 (mg/L) T: 測定温度 (℃) R: 気体定数 (8.314 (Pa・m³/(mol・K)) H_{0solut}: 溶解エンタルピー (1×10⁴ (J/mol))</p> <p>① 信頼性ランク「1」に該当するデータのうち、より信頼性が高いデータ(優先順位は、1A、1Bの順である。)を採用する。同一信頼性ランクでは、測定温度が20～25℃のデータを優先して採用し、次いで測定温度が10～30℃(20～25℃を除く)のデータを採用する。その結果、該当するデータが複数ある場合には4.1(1)、(2)の基準で選択する。</p> <p>② 信頼性ランク「2」のデータが複数ある場合、①と同様に選定する。</p> <p>③ WSKOW (EPI Suite) による25℃における推計値を選定する。このとき、先にキースタディ等の選定ルールに基づき決定されたlogPow及び融点の採用値を用いる。logPow、融点の信頼性ランクがいずれも「2B」以上のとき、得られる</p>

現行	改訂第1版(案)
<p>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。</p>	<p>推計値の信頼性ランクは「2C」とする。それ以外の場合は信頼性ランク「4C」とする。なお、この値を(式3)により、20℃における値に補正し、採用値とする。</p> <p>④ 信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する場合、測定値(信頼性ランク4A)と推計値(信頼性ランク4C)がある場合には測定値を優先する。ここでいうランク「4A」の測定値には、測定温度が10～30℃の範囲外のデータ、測定温度の記載のないデータ及び「3.1 信頼性の定まった情報源」以外の情報源より収集したデータが含まれる。複数の4Aデータがある場合には、20～25℃の測定データ、10～30℃の測定データ、10～30℃の範囲外の測定データ、測定温度記載なしのデータ(20℃における値とみなす)の優先順位とする。</p>
<p>脚注</p> <p>15 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)]、H₀solutは溶解エンタルピー=1×10⁴ (J/mol)。</p> <p>16 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。</p>	<p>脚注</p> <p>16 「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。「不溶」と記載されて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。</p> <p>17 Technical Guidance Document on Risk Assessment. PartII, Chapter 3, 2.3.2 Data for exposure models ECB (2003) のEquation(3)から引用。</p>
<p>4.5 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <p>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。</p>	<p>4.6 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc¹⁸)</p> <p>使用可否基準</p> <p>図表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。</p> <p>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。</p>
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>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、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。</p> <p>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。</p> <p>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」のデータを除く。)を用いる。</p>	<p>キースタディ等の選定ルール</p> <p>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。</p> <p>① 信頼性ランク「1」に該当するデータのうち、より信頼性の高いデータ(優先順位は、1A、1Bの順である。)を採用する。同一信頼性ランクでは、4.1(1)、(2)の基準で選択する。</p> <p>② 信頼性ランク「2」に該当するデータが複数ある場合は、①と同様に選定する。</p> <p>③ KOCWIN (EPI Suite) によるKocの推定値を選定する。この場合、先にキースタディ等の選定ルールに基づき決定された logPow の採用値が信頼性ランク「2B」以上の場合、その値を用いて推計されたKocの信頼性ランクは「2C」とする。logPowの値が「2C」以下の場合は、Kocの信頼性ランクは「4C」とする。</p> <p>④ 信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する場合、測定値(信頼性ランク4A)と推計値(信頼性ランク4C)がある場合には測定値を優先する。</p>
	<p>脚注</p> <p>18 Koc : organic carbon normalized soil-water partition coefficient for organic compounds</p>

現行	改訂第1版(案)
<p>4.6 ヘンリー定数</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <p>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る、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。</p>	<p>4.7 ヘンリー係数</p> <p>使用可否基準</p> <p>図表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。</p> <p>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る、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。</p>
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。</p> <p>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、それを選定する。</p> <p>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、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。</p> <p>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。</p> <p>④ 推定によるヘンリー定数を選定する。</p> <ul style="list-style-type: none"> 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。 $H=VP/(WS/MW)$ <p>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。)を用いる。</p> <ul style="list-style-type: none"> 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」以上の場合は、HENRYWIN (EPI Suite) によるヘンリー係数の推定値¹⁷を選定する。 	<p>キースタディ等の選定ルール</p> <p>① 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。信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータのうち、より信頼性が高いデータを採用する。同一信頼性ランクでは4.1(1)、(2)の基準で選択する。</p> <p>② HENRYWINのBond Estimation Methodにより推計したヘンリー係数を採用値とする。この場合のヘンリー係数の信頼性ランクは「2C」とする。HENRYWINによる推計が不可能な場合には、以下の式¹⁹により算出したヘンリー係数を採用値とする。</p> $H=VP/(WS/MW) \quad (\text{式 4})$ <p>H:ヘンリー係数 (Pa・m³/mol) VP:蒸気圧 (Pa) WS:水に対する溶解度 (g/m³=mg/L) MW:分子量 (g/mol)</p> <p>(式4)で算出したヘンリー係数について、キースタディ等の選定ルールに基づき決定された水に対する溶解度及び蒸気圧の採用値がいずれも信頼性ランク「2B」以上であれば、ヘンリー係数の信頼性ランクは「2C」とする。水に対する溶解度又は蒸気圧のいずれかの採用値が信頼性ランク「2C」以下であれば、ヘンリー係数の信頼性ランクは「4C」とする。</p> <p>③ 信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する場合、測定値(信頼性ランク 4A)と推計値(信頼性ランク 4C)がある場合には測定値を優先する。</p>

現行	改訂第1版(案)
<p>脚注</p> <p>18 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)。</p> <p>19 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。</p>	<p>脚注</p> <p>19 William M. Meylan and Philip H. Howard (1991) Bond Contribution Method for Estimating Henry's Law Constants, Environmental Toxicology and Chemistry, 10, pp1283-1293</p>
<p>4.7 解離定数(酸解離定数)(pKa)</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <p>酸解離定数に関しては、水溶液中におけるデータを使用し、水溶液中以外のデータは使用不可とする。</p>	<p>削除</p>
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。</p> <p>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、それを選定する。</p> <p>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。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。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つのデータの算術平均値を選定する。</p> <p>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。</p> <p>④ SPARC による pKa の推定値を選定する。</p>	<p>削除</p>
<p>脚注</p> <p>20 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。</p>	

現行	改訂第1版(案)
<p>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。)</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <p>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。</p>	<p>4.8 1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)</p> <p>使用可否基準</p> <p>図表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。</p> <p>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。</p>
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。</p> <ol style="list-style-type: none"> 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、それを選定する。 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る。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均値を選定する。 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。 ④ KOWWIN (EPI Suite) によるlog Powの推定値を選定する。 	<p>キースタディ等の選定ルール</p> <p>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等を選定する。</p> <ol style="list-style-type: none"> ① 信頼性ランク「1」に該当するデータのうち、より信頼性が高いデータ(優先順位は、1A、1Bの順である。)を採用値とする。同一信頼性ランクで複数のデータがある場合には4.1(1)、(2)の基準で選択する。 ② 信頼性ランク「2」に該当するデータについても、①と同様に選定する。 ③ KOWWIN (EPI Suite) によるlogPowの推定値(信頼性ランク2C)を採用値とする。 ④ 信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する場合、測定値(信頼性ランク4A)と推定値(信頼性ランク4C)がある場合には測定値を優先する。
<p>脚注</p> <p>21 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。</p> <p>22 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。</p> <p>23 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。</p>	
<p>4.9 生分解性</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・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 <ul style="list-style-type: none"> ・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 	<p>4.9 生分解性</p> <p>使用可否基準</p> <p>図表1の信頼性ランク「1」又は「2A」、「2B」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。</p> <ol style="list-style-type: none"> ① 化審法の判定等に使われたデータ ② 化審法の通知等に準じた試験法による試験データ ③ 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 ④ 「信頼性が高いと認められる情報源」(3.1参照)に記載されている測定データ

現行	改訂第1版(案)																																																																																
<p>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。</p> <p>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</p>	<p>⑤ 類似物質の情報をもとに判定等可能な場合の類似物質の試験データ</p> <p>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、及び変化物を同定していることを前提とする。</p> <p>OECD テストガイドライン302C「Inherent Biodegradability: Modified MITI Test (II)」に準拠した試験データ単独では生分解性の情報として利用しない。</p>																																																																																
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。</p> <ol style="list-style-type: none"> 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。 	<p>キースタディ等の選定ルール</p> <p>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等を選定する。なお、化審法における判定等を経ない場合(以下の②～④の場合)は良分解性であるとは判断できないため、暫定的に、難分解性の物質と同様とみなした取り扱いとする。</p> <ol style="list-style-type: none"> 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等がなされている場合はその結果を採用する。 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、そのデータを採用する。 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、そのデータを採用する。 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： いずれのデータについても「良分解性」ではないと判断される場合は、「難分解性」の物質として取り扱う。それ以外の場合は、審議会の判断とする。 ⑤ 信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合は、「難分解性」の物質として取り扱う。 																																																																																
<p>良分解性の判断について</p> <p>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。</p> <p>表3 OECDテストガイドライン301・310におけるパスレベル</p> <table border="1" data-bbox="71 1720 794 1935"> <thead> <tr> <th>試験法</th> <th>301A</th> <th>301B</th> <th>301C</th> <th>301D</th> <th>301E</th> <th>301F</th> <th>310</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td></td> <td>DOCダイア ウェイ法</td> <td>修正 Sturm 法</td> <td>修正 MITI 法 (I)</td> <td>クローズド ボトル法</td> <td>修正 OECD スクリー ニング法</td> <td>マノメーター 呼吸測定法</td> <td>ヘッドス ペース試験</td> </tr> <tr> <td>生分解性 指標</td> <td>DOC 除去率</td> <td>CO₂ 発生率</td> <td>BOD 除去率</td> <td>BOD 除去率</td> <td>DOC 除去率</td> <td>BOD 除去率</td> <td>ThIC 発生 率</td> </tr> <tr> <td>試験期間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> </tr> <tr> <td>パスレベル</td> <td>≧70%</td> <td>≧60%</td> <td>≧60%</td> <td>≧60%</td> <td>≧70%</td> <td>≧60%</td> <td>≧60%</td> </tr> </tbody> </table>	試験法	301A	301B	301C	301D	301E	301F	310		DOCダイア ウェイ法	修正 Sturm 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	ヘッドス ペース試験	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%	<p>良分解性の判断について</p> <p>化審法における判定等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。図表3に示す一つ以上の方法で良分解性と判断される結果(パスレベル等)が得られた場合には審議会等において「生分解性」の判断を行うための資料として提出する。</p> <p>図表3 OECDテストガイドライン301・310におけるパスレベル</p> <table border="1" data-bbox="794 1720 1522 1935"> <thead> <tr> <th>試験法</th> <th>301A</th> <th>301B</th> <th>301C</th> <th>301D</th> <th>301E</th> <th>301F</th> <th>310</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td></td> <td>DOCダイア ウェイ法</td> <td>修正 Sturm 法</td> <td>修正 MITI 法(I)</td> <td>クローズド ボトル法</td> <td>修正 OECD スクリー ニング法</td> <td>マノメータ ー呼吸測定 法</td> <td>ヘッドス ペース試験</td> </tr> <tr> <td>生分解性 指標</td> <td>DOC 除去率</td> <td>CO₂ 発生率</td> <td>BOD 除去率</td> <td>BOD 除去率</td> <td>DOC 除去率</td> <td>BOD 除去率</td> <td>ThIC 発生 率</td> </tr> <tr> <td>試験期間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> <td>28 日間</td> </tr> <tr> <td>パス レベル</td> <td>≧70%</td> <td>≧60%</td> <td>≧60%</td> <td>≧60%</td> <td>≧70%</td> <td>≧60%</td> <td>≧60%</td> </tr> </tbody> </table>	試験法	301A	301B	301C	301D	301E	301F	310		DOCダイア ウェイ法	修正 Sturm 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	ヘッドス ペース試験	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%
試験法	301A	301B	301C	301D	301E	301F	310																																																																										
	DOCダイア ウェイ法	修正 Sturm 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	ヘッドス ペース試験																																																																										
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%																																																																										
試験法	301A	301B	301C	301D	301E	301F	310																																																																										
	DOCダイア ウェイ法	修正 Sturm 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	ヘッドス ペース試験																																																																										
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%																																																																										

現行	改訂第1版(案)
<p>4.10 生物濃縮性(BCF)</p> <p>使用可否基準</p> <p>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。</p> <p>信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合限り、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。</p>	<p>4.10 生物濃縮性 (BCF²⁰)</p> <p>使用可否基準</p> <p>図表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。</p> <p>信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合限り、信頼性ランク「4」のデータを暫定的に使用する。</p>
<p>キースタディ選定ルール</p> <p>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。</p> <p>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。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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>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、信頼性ランクは「2C」相当とする。</p> <p>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子量1000未満)の場合、以下の</p>	<p>キースタディ等の選定ルール</p> <p>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等を選定する。</p> <p>BCFについては、同一ランクのデータが複数ある場合等には、その中の最大値を採用する点が、他の性状項目におけるキースタディ等選定ルールと異なる。</p> <p>① 化審法の濃縮度試験結果で、生物濃縮性の判定に用いたデータがあればそれをキースタディとする。以下の場合、信頼性ランクは「1A」となる。</p> <ul style="list-style-type: none"> 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(最大値)を採用値とする。 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回の濃縮倍率の算術平均値のうち最も高い値を採用値とする。 「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採用値とする。 化審法の審査・判定において、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は分子量1,000以上)であることから「高濃縮性でない」ことが判定されている場合、BCF=100とする。 <p>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であっても、試験報告書等の詳細が得られる場合は、①に準じて以下のとおりとする。</p> <ul style="list-style-type: none"> 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(最大値)を採用値とする。 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回の濃縮倍率の算術平均値のうち最も倍率の高い値を採用値とする。 <p>試験報告書等の詳細な情報が得られない場合は、以下のとおりとする。</p> <p>③ 信頼性ランク「1A」に該当するデータが複数ある場合は、その中の最大値をキースタディとして採用する。なお、一つの情報源においてBCFの値が範囲で示されている場合には、その上限値(最大値)を採用する。④、⑤においても同じである。</p> <p>④ 信頼性ランク「1B」に該当するデータが複数ある場合は、その中の最大値をキースタディとして採用する。</p> <p>⑤ 信頼性ランク「2B」に該当するデータが複数ある場合は、その中の最大値をキースタディとして採用する。</p> <p>⑥ BCFの測定値がない場合：</p> <ul style="list-style-type: none"> BCFBAF (EPI Suite) による推計値を採用値とする。このと

現行	改訂第1版(案)
<p>⑥-1、⑥-2と⑥-3により選定する(優先度：(高) ⑥-1 > 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 logPow の値を用いる。 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。</p> <p>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 (log Pow が 3.5 未満) 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 「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。) の場合は (式 1) ²² を用いる。 $\log BCF = 1.05 \times \log Pow - 1.71 \text{ (式 1)}$</p> <p>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平均値を用いる。</p> <p>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であって log Pow が 6.0 未満の場合 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 「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 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 を用いる。 $\log BCF = 1.03 \times \log Pow - 1.48 \text{ (式 2)}$</p> <p>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平均値を用いる。</p> <p>⑥-3 log Pow が 6.0 以上の場合 BCFBAFWIN (EPI Suite)、性濃縮性予測システム (CERI モデル) 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平均値を用いる。</p>	<p>き、先にキースタディ等の選定ルールに基づき選定された logPow の採用値を用いる。信頼性ランクは、推計に用いた logPow が信頼性ランク「2B」以上であれば BCF の信頼性ランクは「2C」、推計に用いた logPow が信頼性ランク「2C」以下であれば BCF の信頼性ランクは「4C」となる。</p> <ul style="list-style-type: none"> • BCF の測定値がなく、BCFBAF による推計が不可能である場合、BCF=1,000 とする。なお、この場合、信頼性ランクは「4C」とする。
<p>脚注 24 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。</p>	<p>脚注 20 BCF: Bioconcentration Factor</p>

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

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的全体像を図2に示す。

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想定している。

性状データ選定の全体像

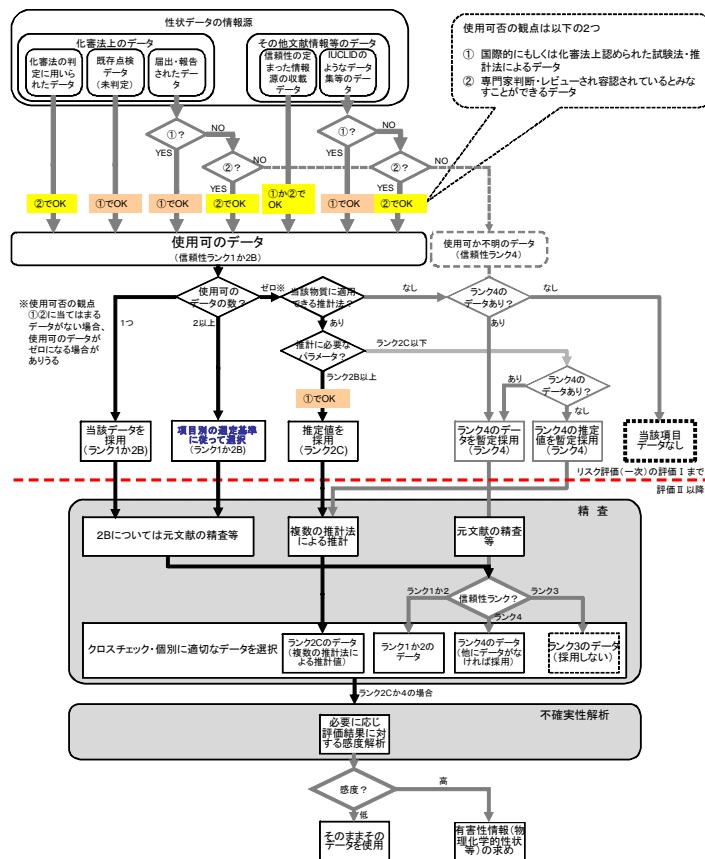


図2 性状データ選定の概念的全体像

削除

6. 国が既知見を収集する情報源の範囲

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)の Information on Registered Substances とする。

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.に則った基準により評価に用いるデータの選定を行う。

3.へ移動

現行	改訂第1版(案)
<p style="text-align: right;">(参考1)</p> <p>「OECD-HPV 化学物質点検マニュアル」での信頼性の考え方</p> <p>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。</p> <p>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 又は 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。</p> <p>○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。</p> <p>○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。</p> <p>○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。</p> <p>○信頼性ランク 4 「Not assignable (評価不能)」 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) に羅列されているだけの試験及びデータ。</p> <p>出典： Klimisch, H.J., Andreae, E. and Tillmann, U. (1997) A systematic approach for evaluating the quality of experimental and</p>	<p>(参考1) OECD の「化学物質点検マニュアル」での信頼性の考え方</p> <p>Klimisch ら²¹ 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。</p> <p>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 又は 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。</p> <p>○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。</p> <p>○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。</p> <p>○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。</p> <p>○信頼性ランク 4 「Not assignable (評価不能)」 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) に羅列されているだけの試験及びデータ。</p>

現行	改訂第1版(案)
ecotoxicological data. Reg. Tox. Pharm., 25, 1-5.	
	脚注 21 Klimisch, H.J., Andreae, E. and Tillmann, U. (1997) A systematic approach for evaluating the quality of experimental and ecotoxicological data. Reg. Tox. Pharm., 25, 1-5.

現行	改訂第1版(案)
<p style="text-align: right;">(参考2)</p> <p>「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</p> <p>1. 既存情報に関する信頼性評価の事例</p> <p>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所の相談窓口が、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。</p> <p>(1) 使用可能性のある情報</p> <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 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) <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 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) <p>(2) 使用可能性のない情報</p> <p>使用可能性のない情報は以下の通りです。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 上記(1)以外の試験報告(OECD信頼性ランク3に該当、例： 	<p>(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</p> <p>1. 既存情報に関する信頼性評価の事例</p> <p>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所の相談窓口が、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。</p> <p>(1) 使用可能性のある情報</p> <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 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) <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 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) <p>(2) 使用可能性のない情報</p> <p>使用可能性のない情報は以下のとおりです。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 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くデータ) ・ 評価できないもの(OECD信頼性ランク4に該当、例：MSDS等)

現行	改訂第1版(案)
<p>不適切な実験方法で実施された実験結果、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くデータ) ・評価できないもの(OECD 信頼性ランク4に該当、例:MSDS 等)</p> <p>2. 信頼性が高いと認められる情報源 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。これら情報源に記載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ください。</p> <p>(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 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は以下のとおりです。 ・The Merck Index –(物理化学的性状) ・Hawley’s Condensed Chemical Dictionary –(物理化学的性状、用途) ・Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology –(用途) ・Patty’s Industrial Hygiene and Toxicology –(ヒト健康影響) ・US EPA IRIS (Integrated Risk Information System) –(ヒト健康影響、NOAELs, RfDs, RfCs and cancer slope factors) ・ATSDR (The Agency for Toxic Substances and Disease Registry) Toxicological Profiles –(ヒト健康影響、用途、暴露情報) ・NTP (National Toxicology Program) Study Report –(ヒト健康影響、用途、暴露情報) ・IARC (International Agency for Research on Cancer) Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans –(ヒト健康影響、用途、暴露情報) ・OSHA (Occupational Safety and Health Administration), ACGIH (American Conference of Industrial Hygienists), AIHA (American Industrial Hygiene Association) –(労働環境基準とその根拠)</p> <p>その他の物理化学的性状に関する参考書 ・Lide’s CRC Handbook of Chemistry and Physics. ・Beilstein Handbook of Organic Chemistry. ・SAX’s Dangerous Properties of Industrial Materials. ・Bretherick’s Handbook of Reactive Chemical Hazards. ・Lange’s Handbook of Chemistry. ・Fire Protection Guide on Hazardous Materials (NFPA; National Fire Protection Association). ・Dust Explosions in the Process Industry (R.K. Eckhoff).</p>	<p>2. 信頼性が高いと認められる情報源 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。これら情報源に記載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ください。</p> <p>(1) OECD-HPV 化学物質点検マニュアルに記載されているもの²² 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は以下のとおりです。 ・ The Merck Index –(物理化学的性状) ・ Hawley’s Condensed Chemical Dictionary –(物理化学的性状、用途) ・ Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology –(用途) ・ Patty’s Industrial Hygiene and Toxicology –(ヒト健康影響) ・ US EPA IRIS (Integrated Risk Information System) –(ヒト健康影響、NOAELs, RfDs, RfCs and cancer slope factors) ・ ATSDR (The Agency for Toxic Substances and Disease Registry) Toxicological Profiles –(ヒト健康影響、用途、暴露情報) ・ NTP (National Toxicology Program) Study Report –(ヒト健康影響、用途、暴露情報) ・ IARC (International Agency for Research on Cancer) Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans –(ヒト健康影響、用途、暴露情報) ・ OSHA (Occupational Safety and Health Administration), ACGIH (American Conference of Industrial Hygienists), AIHA (American Industrial Hygiene Association) –(労働環境基準とその根拠)</p> <p>その他の物理化学的性状に関する参考書 ・ Lide’s CRC Handbook of Chemistry and Physics. ・ Beilstein Handbook of Organic Chemistry. ・ SAX’s Dangerous Properties of Industrial Materials. ・ Bretherick’s Handbook of Reactive Chemical Hazards. ・ Lange’s Handbook of Chemistry. ・ Fire Protection Guide on Hazardous Materials (NFPA; National Fire Protection Association). ・ Dust Explosions in the Process Industry (R.K. Eckhoff).</p>
<p>脚注 21 原文に基づき修正・加筆した。</p>	<p>脚注 22 原文に基づき修正・加筆した。</p>
<p>(参考3) 単位の換算 算術平均値の算出等を行う場合、単位変換は次式に従う。 ① 温度の換算²⁴ $^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow \text{K} : \text{T}(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273.15$</p>	<p>(参考3) 単位の換算 単位変換は次式に従う。 ① 温度の換算²³ $^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow \text{K} : \text{T}(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273.15$</p>

現行	改訂第1版(案)
<p>$^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow ^{\circ}\text{F} : T(^{\circ}\text{C}) = 5/9 [t(^{\circ}\text{F}) - 32]$</p> <p>② 圧力の換算²⁵ $\text{mmHg} \Leftrightarrow \text{Pa} : 1\text{Torr (mmHg)} = 1.333 \times 10^2 \text{ Pa}$ $\text{気圧} \Leftrightarrow \text{Pa} : 1 \text{ 気圧} = 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$</p> <p>③ 水に対する溶解度の換算 水の比重は 1.000 として計算する。</p>	<p>$t(^{\circ}\text{C}) = T(\text{K}) - 273.15$ $^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow ^{\circ}\text{F} :$ $T(^{\circ}\text{C}) = 5/9 [t(^{\circ}\text{F}) - 32]$ $t(^{\circ}\text{F}) = 9/5 \times T(^{\circ}\text{C}) + 32$</p> <p>(換算例) $0^{\circ}\text{C} = 273.15 \text{ K} = 32^{\circ}\text{F}$ $-17.78^{\circ}\text{C} = 255.37 \text{ K} = 0^{\circ}\text{F}$</p> <p>② 圧力の換算²⁴ $\text{mmHg} \Leftrightarrow \text{Pa} :$ $1\text{Torr (mmHg)} = 1.333 \times 10^2 \text{ Pa}$ $\text{気圧} \Leftrightarrow \text{Pa} :$ $1 \text{ 気圧} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$</p> <p>(換算例) $1 \text{ Pa} = 1.00000 \times 10^{-5} \text{ bar} \rightarrow 1 \text{ bar} = 1.00000 \times 10^5 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 9.86923 \times 10^{-6} \text{ atm} \rightarrow 1 \text{ atm} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 1.01972 \times 10^{-5} \text{ atm} (= \text{kgf/cm}^2) \rightarrow 1 \text{ atm} (= \text{kgf/cm}^2) = 9.80665 \times 10^4 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 1.45038 \times 10^{-4} \text{ psi} (= \text{lbf/in}^2) \rightarrow 1 \text{ psi} (= \text{lbf/in}^2) = 6.89476 \times 10^3 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 10 \text{ dyn/cm}^2 \rightarrow 1 \text{ dyn/cm}^2 = 1.00000 \times 10^{-1} \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 7.50062 \times 10^{-3} \text{ mmHg} (= \text{Torr}) \rightarrow 1 \text{ mmHg} (= \text{Torr}) = 1.33322 \times 10^2 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 2.95300 \times 10^{-4} \text{ inHg} \rightarrow 1 \text{ inHg} = 3.3869 \times 10^3 \text{ Pa}$ $1 \text{ Pa} = 1.01972 \times 10^{-4} \text{ mH}_2\text{O} \rightarrow 1 \text{ mH}_2\text{O} = 9.80665 \times 10^3 \text{ Pa}$</p> <p>③ 水に対する溶解度の換算 水の比重は 1.000 として計算する。</p>
<p>脚注 22 OECD テストガイドライン 102 から引用 23 OECD テストガイドライン 103 から引用 (一部修正)</p>	<p>脚注 23 OECD テストガイドライン 102、化学工学便覧改訂 6 版より引用。 24 OECD テストガイドライン 103、化学工学便覧改訂 6 版、理科年表机上版平成 12 年より引用(一部修正)。</p>