

平成 26 年〇月〇日

化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データ の信頼性評価等について【改訂第 1 版（案）】

はじめに

化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律（以下「化審法」という。）の改正により、平成 22 年度に第二種監視化学物質及び第三種監視化学物質を対象に優先評価化学物質を指定するための評価（以下「スクリーニング評価」という。）を行った。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。

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。

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・底質又は土壤に係る分配係数（有機炭素補正土壤吸着係数、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。

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。

（ア）化審法上のデータ¹

（イ）上記（ア）以外の文献情報等のデータ

（ウ）推計（2.2 参照）による定量的データ（（ア）、（イ）を除く。）

スクリーニング評価等に必要なこれらの性状データの信頼性評価とそれらの中から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。

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。

1

2 改訂履歴

3

4 平成 23 年 9 月 15 日 公表

5 平成 24 年 7 月 25 日 補足説明資料公表²

6 平成 26 年○月○日 改訂第 1 版公表

7

8

² http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/ra_12072502.html

目 次

| | | |
|----|---|----|
| 1 | | |
| 2 | | |
| 3 | 1. 性状データの信頼性評価等の考え方 | 1 |
| 4 | 1.1 信頼性評価・信頼性基準・信頼性ランク | 1 |
| 5 | 1.2 使用可否基準 | 1 |
| 6 | 1.3 キースタディ等の選定ルール | 2 |
| 7 | 2. 国際的にもしくは化審法上認められた試験法等 | 3 |
| 8 | 2.1 試験法 | 3 |
| 9 | 2.2 推計方法 | 5 |
| 10 | 3. 国が既知見を収集する情報源の範囲 | 6 |
| 11 | 3.1 信頼性の定まった情報源 | 6 |
| 12 | 3.2 必要に応じて追加する情報源 | 8 |
| 13 | 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 | 8 |
| 14 | 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 | 9 |
| 15 | 4.2 融点 | 10 |
| 16 | 4.3 沸点 | 10 |
| 17 | 4.4 蒸気圧 | 11 |
| 18 | 4.5 水に対する溶解度 | 12 |
| 19 | 4.6 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc) | 13 |
| 20 | 4.7 ヘンリー係数 | 14 |
| 21 | 4.8 1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow) | 15 |
| 22 | 4.9 生分解性 | 15 |
| 23 | 4.10 生物濃縮性 (BCF) | 17 |
| 24 | (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 | 19 |
| 25 | (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 | 20 |
| 26 | (参考3) 単位の換算 | 22 |
| 27 | | |

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36

1. 性状データの信頼性評価等の考え方

1.1 信頼性評価・信頼性基準・信頼性ランク

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。

ここでは、~~図表 1~~ ~~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。

- 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。
- 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。

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。

1.2 使用可否基準

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。

- ・ 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。

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。

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。

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）

図表 1 信頼性ランク、信頼性基準及び使用可否基準

| 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 ¹⁾ 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 ²⁾ 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 ・ OECD-HPV プログラム ³⁾ の SIAR ⁴⁾ のキースタディのうち測定値データであり、かつ Reliability 1 の記載があるデータ（ただし、生分解性以外のデータ） |
| | | 1B | | 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 | — |
| | 2A | 制限付き | — | ・ 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 | | 適用範囲の推計方法 (2.2 参照) による推計値 | — | |
| 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 | | |
| * | 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 | |

2 *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

3 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)

5 2) Good Laboratory Practice : 優良試験所基準

6 3) 現在の OECD Cooperative Chemicals Assessment Programme

7 4) SIDS Initial Assessment Report

8

9

10 1.3 キースタディ等の選定ルール

11 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
12 も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
13 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
14 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
15 (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

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。

1 「ール」を参照)。

2

3 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
4 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。

5

6

7 2. 国際的にもしくは化審法上認められた試験法等

8 2.1 試験法

9 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
10 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。

11 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
12 応じて適宜見直すこととする。

13

14 (1) 融点

15 ① OECD TG 102 (Melting Point)

16 ② JIS K 0064 (化学製品の融点及び溶融範囲測定方法)

17 ③ JIS K 0065 (化学製品の凝固点測定方法)

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

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

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

21 ⑦ EPA OPPTS 830.7200 (Melting Point / Melting Range)

22 ⑧ EU Method A.1 (Melting/Freezing Temperature)

23

24 (2) 沸点

25 ① OECD TG 103 (Boiling point)

26 ② JIS K 0066 (化学製品の蒸留試験方法)

27 ③ ISO 918 (Volatile organic liquids for industrial use – Determination of distillation
28 characteristics)

29 ④ ISO 3924 (Petroleum products - Determination of boiling range distribution – Gas
30 chromatography method)

31 ⑤ ISO 3405:1988 (Petroleum products – Determination of distillation characteristics)

32 ⑥ EPA OPPTS 830.7220 (Boiling Point / Boiling Range)

33 ⑦ EU Method A.2 (Boiling Temperature)

34

35 (3) 蒸気圧

36 ① OECD TG 104 (Vapour Pressure)

37 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)

38 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)

- 1 ④ ISO 3007 (Petroleum products and crude petroleum – Determination of vapor
2 pressure – Reid method)
- 3 ⑤ EPA OPPTS 830.7950 (Vapor Pressure)
- 4 ⑥ EU Method A.4 (Vapour Pressure)
- 5
- 6 (4) 水に対する溶解度
- 7 ① OECD TG 105 (Water Solubility)
- 8 ② EPA OPPTS 830.7840 (Water Solubility)
- 9 ③ EPA OPPTS 830.7860 (Water Solubility Generator Column Method)
- 10 ④ EU Method A.6 (Water Solubility)
- 11
- 12 (5) 有機炭素補正土壌吸着係数
- 13 ① OECD TG 121 (Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on
14 Sewage Sludge using High Performance Liquid Chromatography (HPLC))
- 15 ② OECD TG 106 (Adsorption -Desorption Using a Batch Equilibrium Method)
- 16 ③ EPA OPPTS 835.1110 (Activated Sludge Sorption Isotherm)
- 17 ④ EPA OPPTS 835.1220 (Sediment and Soil Adsorption / Desorption Isotherm)
- 18 ⑤ ISO 18749 (Water quality: adsorption of substances on activated sludge-batch
19 test using specific analytical method.)
- 20 ⑥ EU Method C.19 (Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on
21 Sewage Sludge Using High Performance Liquid Chromatography)
- 22
- 23 (6) 1-オクタノールと水との間の分配係数
- 24 ① OECD TG 107 (Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method)
- 25 ② OECD TG 117 (Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid
26 Chromatography (HPLC) Method)
- 27 ③ OECD TG 123 (Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method)
- 28 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)
- 29 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
30 ー)
- 31 ⑥ EPA OPPTS 830.7550 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Shake Flask
32 Method)
- 33 ⑦ EPA OPPTS 830.7560 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Generator
34 Column Method)
- 35 ⑧ EPA OPPTS 830.7570 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Estimation By
36 Liquid Chromatography)
- 37 ⑨ EU Method A.8 (Partition Coefficient)
- 38

- 1 (7) 生分解性
- 2 ① OECD TG 301A (DOC Die-Away)
- 3 ② OECD TG 301 B (CO₂ Evolution (Modified Sturm Test))
- 4 ③ OECD TG 301C (MITI (I) (Ministry of International Trade and Industry, Japan))
- 5 ④ OECD TG 301D (Closed Bottle)
- 6 ⑤ OECD TG 301E (Modified OECD Screening)
- 7 ⑥ OECD TG 301F (Manometric Respirometry)
- 8 ⑦ OECD TG 302C (Inherent Biodegradability: Modified MITI Test (II))
- 9 ⑧ OECD TG 310 (Ready Biodegradability – CO₂ in sealed vessels (Headspace
- 10 Test))
- 11 ⑨ EU Method C.4 (Determination of Ready Biodegradability)

- 12
- 13 (8) 生物濃縮性⁵
- 14 ① OECD TG 305 (Bioaccumulation in Fish: Aqueous and Dietary Exposure)
- 15 ② OECD TG 305 A (Bioaccumulation: Sequential Static Fish Test)
- 16 ③ OECD TG 305 B (Bioaccumulation: Semi-static Fish Test)
- 17 ④ OECD TG 305 C (Bioaccumulation: Test for the Degree of Bioconcentration in
- 18 Fish)
- 19 ⑤ OECD TG 305 D (Bioaccumulation: Static Fish Test)
- 20 ⑥ OECD TG 305 E (Bioaccumulation: Flow-through Fish Test)
- 21 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)
- 22 ⑧ EPA OPPTS 850.1730 (Fish Bioconcentration Test)
- 23 ⑨ EU Method C.13 (Bioconcentration: Flow-Through Fish Test)

24

25 **2.2 推計方法**

26 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

27 ており、本選定基準においても、[図表 2](#) ~~図表 2~~ に示す推計方法による推計値を信頼性ラン

28 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。)

29 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

30 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。

31

32

33

34 **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 |
| 沸点 | MPBPVP(EPI Suite) | SMILES 又は CAS 番号 | |

⁵ OECD TG 305 A~E は、1996 年に OECD TG 305 に統合された。

⁶ Screening Information Data Set : スクリーニング用情報データセット。

| | | | |
|-----------------------------------|---------------------|--------------------------------|--|
| 蒸気圧 | MPBPVP(EPI Suite) | SMILES 又は CAS 番号、 融点、沸点 | 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⁾ 。 HENRYWIN の適用が不可 可能な場合 ²⁾ は、計算式 $H = \frac{VP}{WS/MW}$ を用いて推計 する。H:ヘンリー係数、 MW:分子質量、WS:水に対 する溶解度、VP:蒸気圧 |
| 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 | |

1 1) EPI Suite™ User's Guide より

2 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。

3

4 Estimation Program Interface (EPI) Suite は、米国環境保護庁 (以下、「U.S. EPA」と
5 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
6 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
7 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
8 ことによって、推計値を計算する。

9

10

11 3. 国が既知見を収集する情報源の範囲

12 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
13 情報源」とする。

14 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
15 キー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。

16 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
17 る場合には、精査等を行うこととする。

18

19 3.1 信頼性の定まった情報源

20 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。
21 信頼性の定まった情報源は、必要に応じ見直しを行う。

22

23 (1) 信頼性が高いと認められる情報源

24 「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
25 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。

1 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
2 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
3 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
4 確認を要さず⁹「信頼性あり」と判断する。

5 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
6 を用いるのが望ましい。

- 7
- 8 ・ CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC-Press,
- 9 ・ Hazardous Substances Data Bank (HSDB), U.S.National Library of Medicine
- 10 ・ Hawley's Condensed Chemical Dictionary, John Wiley & Sons
- 11 ・ SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation
- 12 ・ The Merck Index, Merck & Co
- 13 ・ The IUPAC Solubility Data Series, U.S.National Institute of Standards and
14 Technology
- 15 ・ Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic
16 Chemicals, CRC-Press, 1997

17

18 (2) 専門家によるレビューを経ている情報源

19 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、
20 Reliability の記載があるものは Reliability 1 及び 2 のデータ。Reliability 3 及び Reliability
21 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
22 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。

23 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
24 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
25 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、
26 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。

- 27
- 28 ・ OECD : SIDS Initial Assessment Report
- 29 ・ US/HPV チャレンジプログラム¹⁰
- 30 ・ Japan チャレンジプログラム¹⁰
- 31 ・ 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）
- 32 ・ (独) 製品評価技術基盤機構：「化学物質の初期リスク評価書」、
- 33 (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」

⁷ Guidance on information requirements and chemical safety assessment, Chapter R.7a: Endpoint specific guidance, European Chemicals Agency

⁸ Manual for the Assessment of Chemicals, Chapter 3. Data Evaluation, OECD (2005)

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。

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。

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

7 (3) 専門家が信頼性ありと認めた情報源

8 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
9 ず「信頼性あり」と判断する。

10 図表 1 の基準では、信頼性ランク「2B」と判断される。

- 12 ・ Sigma-Aldrich 試薬カタログ

14 3.2 必要に応じて追加する情報源

15 「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
16 に応じて以下に例示する情報源を収集対象とする。

- 18 ・ EU ECHA (European Chemicals Agency)：Information on Registered Substances
- 19 ・ EU ECB (European Chemicals Bureau)：International Uniform Chemical Information
20 Database (IUCLID)

22 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
23 信頼性評価を行うものとする。

26 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

27 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
28 ない場合には、「キースタディ等」という。

30 「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
31 ータが単一の場合はその値であり、複数の場合は、複数データの中央値
32 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)

33 「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
34 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
35 タが単一の場合はその測定データ等である。

36 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、
37 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
38 なる。

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34

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

(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

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。

(2) 不等号等がついたデータの取り扱いについて

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。

- 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。

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。

(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。

(a) 測定温度が 20℃で約 100 Pa

(b) 測定温度が 10℃で 88 Pa

(3) 信頼性ランク「4」の取り扱い

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

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。

¹² 沸点、蒸気圧、水に対する溶解度等が該当する。

1 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
2 定的に使用する。

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
4 値（信頼性ランク 4C）がある場合には測定値を優先する。

5

6 4.2 融点

7 使用可否基準

8 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。

9 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
10 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
11 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、
12 その旨を明示する。

13 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
14 データを暫定的に使用する。

15

16 キースタディ等の選定ルール

17 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。

- 18 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、
19 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
20 4.1(1)、(2)の基準で選択する。
- 21 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。
- 22 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
23 定する (信頼性ランク 2C)。
- 24 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
25 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。

26

27 4.3 沸点

28 使用可否基準

29 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。

30 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
31 データを暫定的に使用する。

32

33 キースタディ等の選定ルール

34 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。

35 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

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

1 圧力補正を行い、標準圧力における値に補正する¹⁴。

2
$$BP' = BP + 0.00090 \times (273.15 + BP) \times (101.325 - \frac{P}{1000})$$
 (式 1)

3 BP:補正前沸点 (°C)

4 BP':補正後沸点 (°C)

5 P :測定時の圧力 (Pa)

6

7 ① 信頼性ランク「1」に該当するデータのうち、標準圧力で測定された、より信頼性
8 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
9 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
10 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
11 力に補正し、用いる。

12 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。

13 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。

14 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
15 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
16 「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
17 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
18 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
19 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。

20

21 4.4 蒸気圧

22 使用可否基準

23 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。

24 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
25 データを暫定的に使用する。

26

27 キースタディ等の選定ルール

28 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。

29 温度記載 (20°Cを除く) のあるデータは、(式 2) により 20°Cにおける値に補正する¹⁵。

30

31
$$VP' = VP \times \exp[\frac{H_{0vapor}}{R} \times (\frac{1}{T+273.15} - \frac{1}{20+273.15})]$$
 (式 2)

32

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。

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。

1 VP : 補正前蒸気圧 (Pa)
2 VP' : 補正後蒸気圧 (Pa)
3 T : 測定温度 (°C)
4 R : 気体定数 (8.314 Pa・m³/(mol・K))
5 H_{0vapor} : 蒸発エンタルピー (5×10⁴ J/mol)

- 6
7 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、
8 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°Cの試験
9 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°C (20
10 ～25°C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、
11 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。
12 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。
13 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)
14 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
15 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
16 「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
17 場合は信頼性ランク「4C」とする。
18 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
19 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
20 「4A」の測定値には、温度が 10～30°Cの範囲外のデータ、温度の記載のないデー
21 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
22 る。複数の 4A データがある場合には、20～25°Cの測定データ、10～30°Cの測定デ
23 ータ、10～30°Cの範囲外の測定データ、温度記載なしのデータ (20°Cにおける値と
24 みなす) の優先順位とする。

25 26 4.5 水に対する溶解度

27 **使用可否基準**

28 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。
29 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
30 データを暫定的に使用する。

31 32 **キースタディ等の選定ルール**

33 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。
34 温度記載 (20°Cを除く) のあるデータは、(式 3) により 20°Cにおける値に補正する¹⁷。

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。

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。

1

2 $WS' = WS \times \exp\left[\frac{H0solut}{R} \times \left(\frac{1}{T+273.15} - \frac{1}{20+273.15}\right)\right]$ (式 3)

3 WS:補正前溶解度 (mg/L)

4 WS':補正後溶解度 (mg/L)

5 T: 測定温度 (°C)

6 R: 気体定数 (8.314 (Pa・m³/(mol・K)))

7 H0solut: 溶解エンタルピー (1×10⁴ (J/mol))

8

9 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、
10 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°C の
11 データを優先して採用し、次いで測定温度が 10～30°C（20～25°C を除く）のデータを
12 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
13 る。

14 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。

15 ③ WSKOW (EPI Suite) による 25°Cにおける推計値を選定する。このとき、先にキー
16 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。
17 logPow、融点の信頼性ランクがいずれも「2B」以上のとき、得られる推計値の信
18 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、
19 この値を (式 3) により、20°Cにおける値に補正し、採用値とする。

20 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
21 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
22 「4A」の測定値には、測定温度が 10～30°Cの範囲外のデータ、測定温度の記載の
23 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
24 が含まれる。複数の 4A データがある場合には、20～25°Cの測定データ、10～30°C
25 の測定データ、10～30°Cの範囲外の測定データ、測定温度記載なしのデータ（20°C
26 における値とみなす）の優先順位とする。

27

28 4.6 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc¹⁸)

29 使用可否基準

30 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。

31 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
32 データを暫定的に使用する。

33

34 キースタディ等の選定ルール

¹⁸ Koc : organic carbon normalized soil-water partition coefficient for organic compounds

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。

2 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、
3 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
4 選択する。

5 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。

6 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
7 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
8 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
9 の値が「2C」以下の場合、Koc の信頼性ランクは「4C」とする。

10 ⑤ 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
11 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。

14 4.7 ヘンリー係数

15 使用可否基準

16 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。

17 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
18 データを暫定的に使用する。

20 キースタディ等の選定ルール

21 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
22 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
23 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。

24 ② HENRYWIN の Bond Estimation Method により推計したヘンリー係数を採用値と
25 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
26 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
27 する。

$$29 \quad H = VP / (WS / MW) \quad (\text{式 4})$$

30 H:ヘンリー係数 (Pa・m³/mol)

31 VP:蒸気圧 (Pa)

32 WS:水に対する溶解度 (g/m³=mg/L)

33 MW:分子質量 (g/mol)

35 (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

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

1 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
2 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
3 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
4 頼性ランクは「4C」とする。

- 5 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
6 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。

9 4.8 1-オクタノールと水との間の分配係数（logPow）

10 使用可否基準

11 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。

12 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
13 データを暫定的に使用する。

15 キースタディ等の選定ルール

16 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。

- 17 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、
18 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
19 場合には 4.1(1)、(2) の基準で選択する。
- 20 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。
- 21 ③ KOWWIN (EPI Suite) による logPow の推計値（信頼性ランク 2C）を採用値と
22 する。
- 23 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
24 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。

26 4.9 生分解性

27 使用可否基準

28 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
29 リーニング評価等に利用可能なデータの候補とする。

- 30
- 31 ① 化審法の判定等に使われたデータ
- 32 ② 化審法の通知等に準じた試験法による試験データ
- 33 ③ OECD テストガイドライン 301「Ready Biodegradability (易生分解性)」シリーズ
34 及び 310「Ready Biodegradability – CO₂ in sealed vessels (Headspace Test) (易生
35 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
- 36 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
- 37 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

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。

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。

キースタディ等の選定ルール

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等を選定する。なお、化審法における判定等を経していない場合（以下の②～④の場合）は良分解性であると判断できないため、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。

- 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一つであれば、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。

良分解性の判断について

化審法における判定等を経していない物質の場合は、審議会等での判断を経ることを原則とする。[図表 3](#) [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。

図表 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 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 | |
| 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% |

4.10 生物濃縮性 (BCF²⁰)

使用可否基準

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。

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。

キースタディ等の選定ルール

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等を選定する。

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。

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。

- ・ 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つては分子量 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。

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。

- ・ 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。

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。

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。

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。

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。

²⁰ BCF: Bioconcentration Factor

- 1 ⑥ BCF の測定値がない場合：
- 2 • BCFBAF (EPI Suite) による推計値を採用値とする。このとき、先にキースタディ
- 3 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、
- 4 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
- 5 「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
- 6 ランクは「4C」となる。
- 7 • 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
- 8 する。なお、この場合、信頼性ランクは「4C」とする。
- 9
- 10

1
2 (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

3
4 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
5 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
6 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
7 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
8 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。

9 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
10 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
11 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
12 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
13 の信頼性評価を行うものとする。

14
15 ○信頼性ランク 1

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

17 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
18 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
19 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
20 と密接に関連しているか同等である試験又はデータ。

21 ○信頼性ランク 2

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

23 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
24 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、
25 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)
26 試験又はデータ。

27 ○信頼性ランク 3

28 「Not reliable (信頼性なし)」

29 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
30 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
31 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。

32 ○信頼性ランク 4

33 「Not assignable (評価不能)」

34 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
35 羅列されているだけの試験及びデータ。

36
37

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.

1 (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

2
3 1. 既存情報に関する信頼性評価の事例

4 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
5 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、
6 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。
7 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
8 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
9 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
10 行いますのでご相談ください。

11
12 (1) 使用可能性のある情報

13 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。

- 14 ・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
15 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)
- 16 ・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
17 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
18 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)
- 19 ・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
20 (OECD 信頼性ランク 2 に該当)
- 21 ・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)
22 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
23 す。
- 24 ・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
25 頼性ランク 1 に該当)
- 26 ・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
27 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。
28 (OECD 信頼性ランク 2 に該当)
- 29 ・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
30 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
31 信頼性ランク 2 に該当)
- 32 ・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)

33
34 (2) 使用可能性のない情報

35 使用可能性のない情報は以下のとおりです。

- 36 ・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
37 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)
- 38 ・評価できないもの(OECD 信頼性ランク 4 に該当、例：MSDS 等)

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37

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。

(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)

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).

²²原文に基づき修正・加筆した。

1 (参考3) 単位の換算

2

3 単位変換は次式に従う。

4 ① 温度の換算²³

5 °C ⇔ K :

6 $T(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273.15$

7 $t(^{\circ}\text{C}) = T(\text{K}) - 273.15$

8 °C ⇔ °F :

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

10 $t(^{\circ}\text{F}) = 9/5 \times T(^{\circ}\text{C}) + 32$

11 (換算例)

12 $0^{\circ}\text{C} = 273.15 \text{ K} = 32^{\circ}\text{F}$

13 $-17.78^{\circ}\text{C} = 255.37 \text{ K} = 0^{\circ}\text{F}$

14

15 ② 圧力の換算²⁴

16 mmHg ⇔ Pa :

17 $1 \text{ Torr (mmHg)} = 1.333 \times 10^2 \text{ Pa}$

18 気圧 ⇔ Pa :

19 $1 \text{ 気圧} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$

20

21 (換算例)

22 $1 \text{ Pa} = 1.00000 \times 10^{-5} \text{ bar} \rightarrow 1 \text{ bar} = 1.00000 \times 10^5 \text{ Pa}$

23 $1 \text{ Pa} = 9.86923 \times 10^{-6} \text{ atm} \rightarrow 1 \text{ atm} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$

24 $1 \text{ Pa} = 1.01972 \times 10^{-5} \text{ atm} (= \text{kgf/cm}^2) \rightarrow 1 \text{ atm} (= \text{kgf/cm}^2) = 9.80665 \times 10^4 \text{ Pa}$

25 $1 \text{ Pa} = 1.45038 \times 10^{-4} \text{ psi} (= \text{lbf/in}^2) \rightarrow 1 \text{ psi} (= \text{lbf/in}^2) = 6.89476 \times 10^3 \text{ Pa}$

26 $1 \text{ Pa} = 10 \text{ dyn/cm}^2 \rightarrow 1 \text{ dyn/cm}^2 = 1.00000 \times 10^{-1} \text{ Pa}$

27 $1 \text{ Pa} = 7.50062 \times 10^{-3} \text{ mmHg} (= \text{Torr}) \rightarrow 1 \text{ mmHg} (= \text{Torr}) = 1.33322 \times 10^2 \text{ Pa}$

28 $1 \text{ Pa} = 2.95300 \times 10^{-4} \text{ inHg} \rightarrow 1 \text{ inHg} = 3.3869 \times 10^3 \text{ Pa}$

29 $1 \text{ Pa} = 1.01972 \times 10^{-4} \text{ mH}_2\text{O} \rightarrow 1 \text{ mH}_2\text{O} = 9.80665 \times 10^3 \text{ Pa}$

30

31 ③ 水に対する溶解度の換算

32 水の比重は 1.000 として計算する。

33

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)。