

1 化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データ 2 の信頼性評価等について（案） 3 4

5 はじめに

6 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律（以下「化審法」という。）の改正により、
7 平成 22 年度に第二種監視化学物質及び第三種監視化学物質を対象に優先評価化学物質を指
8 定するための評価（以下「スクリーニング評価」という。）を行い、平成 23 年度以降に一
9 般化学物質及び新規化学物質を対象に優先評価化学物質を選定するためのスクリーニング
10 評価を開始し、引き続きリスク評価を実施する予定となっている。

11 ここでは、このスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価 I（以下、「スクリーニ
12 ング評価等」という。）で利用する物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データ（以下「性
13 状データ」という。）について、信頼性の評価とスクリーニング評価等で用いるデータ（キ
14 ースタディ）の選定ルールについて規定する。

15 対象となる性状データは、融点、沸点、蒸気圧、水に対する溶解度、1-オクタノールと
16 水との間の分配係数、大気・水域・底質又は土壌に係る分配係数（有機炭素補正土壌吸着
17 係数、ヘンリー係数¹に限る。）、解離定数（酸解離定数に限る。）、生分解性、生物濃縮性に
18 関するデータである。

19 これらの性状データの情報源は次の（ア）～（ウ）に大別される。

20
21 （ア）化審法上のデータ²

22 （イ）上記（ア）以外の文献情報等のデータ

23 （ウ）適用範囲の推定方法（2.2 参照）による定量的データ（（ア）、（イ）を除く。）
24

25 スクリーニング評価等に必要なこれらの性状データの信頼性評価とそれらの中からのキ
26 ースタディの選定は、審査・判定と同等に行うことが理想的であるが、スクリーニング評
27 価の一環として、多数の既存化学物質の性状データの信頼性評価やキースタディ選定を限
28 られた時間内に効果的・効率的に審査・判定と同等に行うことは難しいと考えられる。そ
29 こで、円滑な信頼性評価やキースタディ選定等を行うことを目的とし、これらの性状デー
30 タの信頼性を確認する基準（以下、「信頼性基準」という。）、信頼性を付与した性状デー
31 タがスクリーニング評価等に利用できるかどうかの判断基準（以下、「使用可否基準」という。）
32 及びスクリーニング評価等に用いるキースタディを選定するルール（以下「キースタディ
33 選定ルール」という。）（以下、この 3 つを併せ「選定基準」という。）をあらかじめ定め、

¹ ヘンリー係数：化学大辞典。ヘンリー定数、ヘンリー則定数と表現される場合もある。有害性情報の報告に関する省令（平成 16 年 3 月 18 日）に規定する蒸気圧及び水に対する溶解度より算出できる。

² 判定に用いられたデータ、国による試験データ、事業者より報告されたデータ

34 その選定基準に従って(ア)～(ウ)の性状データの中からスクリーニング評価等に使用する
35 性状データを選定することとする。また、優先評価化学物質の選定プロセスに科学的な客
36 観性と透明性を持たせるために、性状の項目別に使用可否基準とキースタディ選定ルール
37 を設定する。

38

39 1. 性状データに関する選定基準の考え方

40 1.1 信頼性ランクと使用可否基準

41 性状データの信頼性を、以下に示す、「信頼性が高い（信頼性ランク 1）」、「信頼性がある（信頼性ランク 2）」、「信頼性が不十分（信頼性ランク 3）」、「信頼性が判断できない（信頼性ランク 4）」の 4 つの信頼性ランクに分類する。

44 この信頼性ランクは、「OECD-HPV 化学物質点検マニュアル」での信頼性の考え方（参考
45 1）、「Japan チャレンジスポンサーマニュアル³」での信頼性ランク分類の目安（参考 2）
46 を参考に整理したものであり、

47 (1) 国際的に、もしくは化審法上認められた試験法（推計法を含む）等によるデータであるか
48

49 (2) 専門家によりレビューされている、もしくはレビューされているとみなすことができるデータであるか
50

51 の 2 つの観点から分類している（表 1）。

52

53 スクリーニング評価等には、信頼性ランクが付与された性状データのうち、信頼性ラン
54 ク「1」又は信頼性ランク「2」に該当する性状データを原則使用するものとする。

55 信頼性ランク「3」に該当する性状データは、使用しない。

56 信頼性ランク「4」に該当する性状データは、原則使用しない。

57 なお、信頼性ランク「1」又は「2」に該当するデータがない場合に限り、信頼性ラン
58 ク「4」に該当する性状データを暫定的に使用することがある。

59

60 (参考) 信頼性ランク「4」に該当する性状データを、リスク評価（一次）評価Ⅱ以降に
61 使用する場合には、精査等を行うこととする。

62

63 なお、ランクのより上位に該当するデータであっても、試験条件や結果の有効性が必ず
64 しも担保されていない場合もあり得る。性状データ選定に係る全体の流れ（図 2）の中で
65 こうしたデータが確認された場合は使用しないと判断することもある。性状データごとの
66 使用可否基準については、「4. 性状の項目別の使用可否基準とキースタディ選定ルール」
67 の「使用可否基準」を参照。

68

³ 既存化学物質安全性情報収集・発信プログラムスポンサーマニュアル（詳細版）

69 【信頼性ランク 1 (信頼性が高い)】

70 ・化審法通知⁴の試験法、OECD テストガイドライン (2.1 参照) 及びそれに準じた試験
71 法 (参考 3) によるもので GLP 準拠のもの (信頼性ランク 1 A)。

72 ・化審法の判定結果を導くために直接的に使われたデータ及び OECD-HPV プログラムの
73 SIAR (SIDS Initial Assessment Report) で使用されたデータ (キースタディがあるものは
74 そのデータ、Reliability の記載があるものは信頼性ランク 1 及び 2 のデータを採用す
75 る。) (信頼性ランク 1 A)。

76 ・化審法通知の試験法、OECD テストガイドライン (2.1 参照) 及びそれに準じた試験
77 法 (参考 3) によるもので GLP 準拠でないもの、または不明なもの (信頼性ランク 1 B)。

78 ・生分解性については、上記によらず、「4.9 生分解性」の使用可否基準を参照のこと。

79 【信頼性ランク 2 (信頼性がある)】

80 ・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
81 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
82 データ (信頼性ランク 2 A)。

83 ・「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 (信頼性ランク
84 2 B)。

85 ・適用範囲の推定方法 (2.2 参照) による推定値 (信頼性ランク 2 C)。

86 【信頼性ランク 3 (信頼性が不十分)】

87 ・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
88 ータ。

89 【信頼性ランク 4 (信頼性が確認できない)】

90 ・試験法及び情報源が不明なデータ。

91 ・試験法等の詳細が不明で、信頼性ランク 2 A か 3 かの判断ができないデータ。

92

93

94

⁴ 新規化学物質等の試験の方法について (平成 23 年 3 月 31 日薬食発 0331 第 7 号、平成 23・03・29 製局第 5 号、環保企発第 110331009 号)

表 1 信頼性ランクと使用可否基準

使用可否基準	信頼性ランク		信頼性を評価する観点			
			国際的に、もしくは化審法上認められた試験法等によるデータ	専門家によりレビューされているとみなすことができるデータ		
原則使用可	信頼性あり	1A	無制限	化審法又は OECD テストガイドライン (2.1 参照) 及びそれに準じた試験法 (参考 3) によるもので GLP 準拠のもの。	化審法の判定結果を導くために直接的に使われたデータ及び OECD / HPV プログラムの SIAR (SIDS Initial Assessment Report) で使用されたデータ (キースタディがあるものはそのデータ、Reliability の記載があるものは信頼性ランク 1 及び 2 のデータ) (ただし、分解性以外のデータ)	
				1B	化審法又は OECD テストガイドライン (2.1 参照) 及びそれに準じた試験法 (参考 3) によるもので GLP 準拠でないもの又は、不明なもの。	—
		2A		制限付き	—	OECD テストガイドライン (2.1 参照) 及びそれに準じた試験法 (参考 3) に準拠していないが、専門家により科学的に受け入れられると判断された試験法によるデータ。
		2B			—	「信頼性の定まった情報源」(3 参照) に収録されている測定値データ。
		2C			適用範囲の推定方法 (2.2 参照) による推定値。	専門家が判断したカテゴリーアプローチによる推定値。
使用不可	信頼性不十分	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	信頼性不明	4	—	試験法及び情報源が不明なデータ、又は試験法等の詳細が不明でランク 2 A か 3 かの判断を行うことができないデータ。		

96

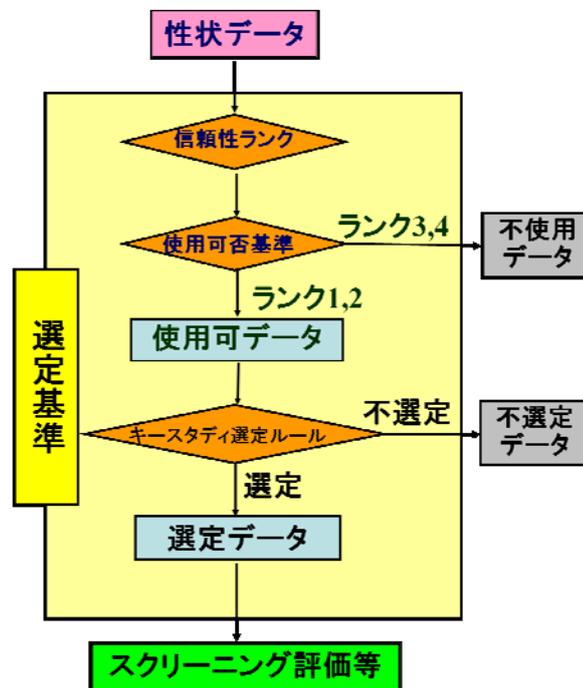
97 1.2 キースタディ選定ルール

98 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
99 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
100 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
101 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 (「4. 性状の項目別の使用可
102 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)。

103

104 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
105 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
106 のこと。

107



108

109

110

111

112

図1 物性データに関する概念的選定基準

113

2. 国際的に、もしくは化審法上認められた試験法等

114

2.1 試験法

115

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（参考3）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。

116

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。

117

118

119

(1) 融点

120

OECD TG 102 (Melting Point/ Melting Rang)

121

(2) 沸点

122

OECD TG 103 (Boiling point/boiling range)

123

(3) 蒸気圧

124

OECD TG 104 (Vapour Pressure Curve)

125

(4) 水に対する溶解度

126

OECD TG 105 (Water Solubility)

127

(5) 有機炭素補正土壌吸着係数

128

① OECD TG 121 (Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on Sewage Sludge)

- 129 using High Performance Liquid Chromatography (HPLC))
- 130 ② OECD TG 106 (Adsorption -Desorption Using a Batch Equilibrium Method)
- 131 (6) 解離定数 (酸解離定数)
- 132 OECD TG 112 (Dissociation Constants in Water)
- 133 (7) 1-オクタノールと水との間の分配係数
- 134 ① OECD TG 107 (Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method)
- 135 ② OECD TG 117 (Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid
- 136 Chromatography (HPLC) Method)
- 137 ③ OECD TG 123 (Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method)
- 138 (8) 生分解性
- 139 ① OECD TG 301A (DOC Die-Away)
- 140 ② OECD TG 301 B (CO₂ Evolution (Modified Sturm Test))
- 141 ③ OECD TG 301C (MITI (I) (Ministry of International Trade and Industry, Japan))
- 142 ④ OECD TG 301D (Closed Bottle)
- 143 ⑤ OECD TG 301E (Modified OECD Screening)
- 144 ⑥ OECD TG 301F (Manometric Respirometry)
- 145 ⑦ OECD TG 310 (Ready Biodegradability – CO₂ in sealed vessels (Headspace Test))
- 146 (9) 生物濃縮性⁵
- 147 ① OECD TG 305 (Bioconcentration: Flow-through Fish Test)
- 148 ② OECD TG 305 A (Bioaccumulation: Sequential Static Fish Test)
- 149 ③ OECD TG 305 B (Bioaccumulation: Semi-static Fish Test)
- 150 ④ OECD TG 305 C (Bioaccumulation: Test for the Degree of Bioconcentration in Fish)
- 151 ⑤ OECD TG 305 D (Bioaccumulation: Static Fish Test)
- 152 ⑥ OECD TG 305 E (Bioaccumulation: Flow-through Fish Test)

153

154 2.2 推定方法

155 「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
 156 めており、本選定基準においても、適用範囲の推定方法による推定値を、信頼性ランク「2
 157 C」のデータ（入力データが信頼性ランク「2 B」以上の場合に限る。）として補完すること
 158 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「2 C」以下の場合、得られ
 159 る推定値は、信頼性ランク「4」（信頼性不明）とする。

160 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
 161 に示す。

162

163

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

164

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
沸点	MPBPWIN (EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号	化合物、分子量が 1000
蒸気圧	MPBPWIN (EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号、 融点、沸点	を超える物質、反応 性・加水分解性物質、
水に対する溶解度	WSKOWWIN (EPI Suite) ※ ¹	SMILES 又は CAS 番号、 Log Kow、融点、MW	1・2 族の陽イオン塩 化合物以外の物質※ ⁵
有機炭素補正土壌吸着 係数 (Koc)	KOCWIN (EPI Suite) ※ ²	SMILES 又は CAS 番号、 Log Kow	
1-オクタノールと水と の間の分配係数 (log Kow)	KOWWIN (EPI Suite)	SMILES 又は CAS 番号	
生物濃縮係数 (BCF)	BCFBAFWIN (EPI Suite) ※ ³	SMILES 又は CAS 番号、 Log Kow	同上、4.10 参照
	回帰式 (4.10 参照)	Log Kow	4.10 参照
ヘンリー係数	HENRYWIN (EPI Suite) ※ ⁴	SMILES 又は CAS 番号	水に対する溶解度 ≥ 1 mol/L (4.6 参照) ※ ⁶
	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※ ⁷

165 ※1：トレーニングセットの適用範囲：分子量 (MW) = 27~628、Log Kow=-3.9~8.3

166 ※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

167 ※3：トレーニングセットの適用範囲：分子量 (MW) = 68~959、Log Kow=-1.4~11.3

168 ※4：トレーニングセットの適用範囲：分子量 (MW) = 26~451

169 ※5：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
170 用 (2011 年 3 月 3 日現在不通)

171 ※6：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

172 ※7：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
173 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

174

175

176 Estimation Program Interface (EPI) Suite は、米国環境保護庁 (以下、「U.S. EPA」という。)
177 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
178 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

179 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
180 って、推定値を計算する。

181 SPARC は、SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry のことで、米国ジョージア
182 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
183 エアであり、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
184 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
185 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
186 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。

187

188 3. 信頼性の定まった情報源

189 3.1 信頼性の定まったとされるデータベースに収録されているデータ

190 「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
191 いて、信頼性の定まったとされるデータベースに収録されているデータの使用を認めてい
192 る。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
193 学物質点検マニュアル」、「REACH の技術ガイダンス」でピアレビューされている次の情報
194 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せず⁶信頼性ありと判断する。
195 （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
196 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。）

197

- 198 ・ CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th, CRC-Press, 2009
- 199 ・ Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
- 200 ・ Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
- 201 ・ SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
- 202 ・ The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
- 203 ・ The IUPAC Solubility Data Series
- 204 ・ Illustrated Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic
205 Chemicals, CRC-Press, 1997

206

207 3.2 専門家によるレビューを経ているデータ

208 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、
209 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
210 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せず原則として
211 信頼性ありと判断する。（表 1 に示す基準では、信頼性ランク「2B」と判断されが、2.1
212 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

⁶ 「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。

213 れる。)

214 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
215 キースタディ > Reliability 1 > Reliability 2 とする。

216

217 ・ US/HPV チャレンジプログラム

218 ・ Japan チャレンジプログラム

219 ・ (独)製品評価技術基盤機構：「化学物質の初期リスク評価書」

220 ・ (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」

221 ・ 環境省環境リスク評価室：「化学物質の環境リスク評価」

222 ・ WHO/IPCS：「環境保健クライテリア (EHC)」

223 ・ WHO/IPCS：「国際簡潔評価文書 (CICAD)」

224 ・ ATSDR (米国毒性物質疾病登録局)：「Toxicological Profile」

225 ・ EU ECB (European Chemicals Bureau)：「リスク評価書 (EU Risk Assessment Report)」

226

227 (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
228 する場合には、精査等を行うこととする。

229

230 3.3 専門家が信頼性ありと認めたデータ

231 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
232 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。)

233

234 ・ Sigma-Aldrich 試薬カタログ

235

236 (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
237 る場合には、精査等を行うこととする。

238

239 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

240 4.1 融点

241 使用可否基準

242 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。

243 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、
244 その旨を明示する。得られたデータが溶融範囲又は凝固範囲である場合は、その範囲の平
245 均値を融点又は凝固点として扱う。

246 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
247 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
248 示する。

249 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」
250 のデータを暫定的に使用する。

251

252 キースタディ選定ルール

253 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。

- 254 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、
255 それを採用する。
- 256 ② 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複数ある場合は、
257 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 $\pm 10^{\circ}\text{C}$ 以内⁷で
258 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 $\pm 10^{\circ}\text{C}$ を超えるデータ
259 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
260 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
261 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
262 の融点としては2つのデータの算術平均値を採用する。
- 263 ③ MPBPWIN (EPI Suite) による融点の推定値を選定する。

264

265 4.2 沸点

266 使用可否基準

267 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。

268 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。

269 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」
270 のデータを暫定的に使用する。

271

272 キースタディ選定ルール

273 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。

274 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
275 力 (101.3 kPa) における値に換算する⁸。

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

276

- 277 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、
278 それを採用する (圧力記載のデータを優先する)。
- 279 ② 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複数ある場合は、

⁷ REACH の技術ガイダンスでの測定値の推定精度 $\pm 2.0\text{K}$ を参考に設定。

⁸ 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 ($^{\circ}\text{C}$)、BP' は補正後沸点 ($^{\circ}\text{C}$)、P は圧力 (Pa)。

280 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⁹
 281 である場合は算術平均値に最も近い測定値を選定する（圧力記載のデータを優先する）。
 282 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
 283 算術平均値を求め、その値に最も近い測定値を選定する（圧力記載のデータを優先する）。
 284 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。
 285 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
 286 タの算術平均値を採用する。

287 ③ MPBPWIN (EPI Suite) による沸点の推定値を選定する。

288

289 4.3 蒸気圧

290 使用可否基準

291 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。

292 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」
 293 のデータを暫定的に使用する。

294

295 キースタディ選定ルール

296 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。

297 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、
 298 それを採用する（ $20\sim 25^{\circ}\text{C}$ での値を優先する）。

299 $20\sim 25^{\circ}\text{C}$ の値が得られない場合は、 $20\sim 25^{\circ}\text{C}$ 以外の温度での値、温度記載のない測定
 300 値を選定する。

301 ② 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複数ある場合は、
 302 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 $\pm 50\%$ 以内¹⁰
 303 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 $\pm 50\%$ を超えるデー
 304 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
 305 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
 306 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
 307 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。

308 ③ 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
 309 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。

310

311 温度記載のある蒸気圧は、 20°C における値に換算する。温度補正は次に示す式を用いる¹¹。

⁹ 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。

¹⁰ 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。

¹¹ 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 ($8.314 \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/(\text{mol}\cdot\text{K})$)、H₀vapor は蒸発エンタルピー ($5\times 10^4 \text{ J/mol}$)。

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

312

313 4.4 水に対する溶解度

314 使用可否基準

315 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。

316 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」
317 のデータを暫定的に使用する。

318

319 キースタディ選定ルール

320 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。

321 ① 信頼性ランク「1」又は「2」で最も高いデータが1つであれば、それを採用する（20
322 ～25℃における値を優先する）。20～25℃での値が得られない場合は、20～25℃以外の
323 温度での値、温度記載のない測定値を選定する。324 ② 信頼性ランク「1」又は「2」で最も高いデータが複数ある場合は、その算術平均値
325 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¹²である場合は算
326 術平均値に最も近い測定値を選定する（温度記載のデータを優先）。算術平均値±30%
327 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、
328 その値に最も近い測定値を選定する（温度記載のデータを優先）。なお、データが2つ
329 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
330 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
331 算術平均値を採用する。332 ③ 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
333 ースタディ選定ルールに基づき決定された log Kow の値を用いる。334 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¹³。

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

335

336 「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
337 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
338 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。

339

¹² 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。

¹³ ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part II, Chapter 3, 2.3.2 Data for exposure models の式(3)から引用、WS は補正前水溶解度 (mg/L)、WS' は補正後水溶解度 (mg/L)、T は温度 (K)、R は気体定数=8.314 [Pa・m³/(mol・K)]、H_{0solut} は溶解エンタルピー=1×10⁴ (J/mol)。

340 4.5 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)

341 使用可否基準

342 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。

343 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」
344 のデータを暫定的に使用する。

345

346 キースタディ選定ルール

347 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。

348 ① 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、
349 それを採用する。350 ② 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、
351 その算術平均値、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
352 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
353 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。354 ③ 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
355 ルールに基づき決定されたlog Kowの値を用いる。

356

357 4.6 ヘンリー係数

358 使用可否基準

359 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。

360 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」
361 のデータを暫定的に使用する。

362

363 キースタディ選定ルール

364 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。

365 ① 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、
366 それを選定する。367 ② 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、
368 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
369 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
370 タをキースタディとし、化学物質のヘンリー係数としては2つのデータの算術平均値
371 を採用する。

372 ③ 推計方法によるヘンリー係数を選定する。

373 ・ 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」未満の場
374 合は、次の計算式¹⁴によるヘンリー係数を選定する。

¹⁴ William M. Meylan and Philip H. Howard (1991) Bond Contribution Method for Estimating Henry's Law

375

376 $H=VP/(WS/MW)$

377

378 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
379 蒸気圧 (VP) の値を用いる。

380 ・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
381 合は、HENRYWIN (EPI Suite) によるヘンリー係数の推定値¹⁵を選定する。

382

383 4.7 解離定数 (酸解離定数) (pKa)

384 使用可否基準

385 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。

386 酸解離定数に関しては、水溶媒中におけるデータを使用し、水溶媒中以外のデータは使
387 用不可とする。

388

389 キースタディ選定ルール

390 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。

391 ① 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、
392 それを選定する。

393 ② 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、
394 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¹⁶で
395 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
396 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
397 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
398 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
399 のpKaとしては2つのデータの算術平均値を選定する。

400 ③ SPARCによるpKaの推定値を選定する。

401

402 4.8 1-オクタノールと水との間の分配係数 (log Kow 又は log Pow)

403 使用可否基準

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)。

¹⁵ 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。

¹⁶ 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。

404 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。
 405 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」
 406 のデータを暫定的に使用する。

407

408 キースタディ選定ルール

409 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。

- 410 ① 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、
 411 それを選定する。
- 412 ② 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、
 413 「 $-2.0 < \log Kow \leq 4.0$ 」¹⁷のときはフラスコ振とう法、「 $4.0 < \log Kow \leq 6.0$ 」¹⁸のときは
 414 HPLC 法による値を優先する。
- 415 ③ 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¹⁹である
 416 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
 417 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
 418 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
 419 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
 420 Kow としては2つのデータの算術平均値を選定する。
- 421 ④ KOWWIN (EPI Suite) による log Kow の推定値を選定する。

422

423 4.9 生分解性

424 使用可否基準

425 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
 426 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。

- 427 ・化審法の判定に使われたデータ
- 428 ・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
- 429 ・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
 430 「Ready Biodegradability – CO₂ in sealed vessels (Headspace Test) (易生分解性-密閉容器中
 431 のCO₂ (ヘッドスペース試験))」に準拠した試験結果
- 432 ・「信頼性の定まった情報源」(3 参照)からの測定データ

433 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
 434 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
 435 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
 436 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。

437 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」

¹⁷ 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。

¹⁸ 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。

¹⁹ 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。

438 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
439 び、分解生成物を同定していることが前提となる。

440

441 キースタディ選定ルール

442 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。

443 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
444 いる場合はそれを選定する。

445 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
446 験データに該当するデータがあれば、それを選定する。

447 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、
448 それを選定する。

449 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
450 審議会の判断とする。

451

452 良分解性の判断について

453 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
454 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
455 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
456 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
457 めの資料として提出する。

458

459 表3 OECDテストガイドライン301・310におけるパスレベル

試験法	301A	301B	301C	301D	301E	301F	310
	DOCダイア ウェイ法	修正 Strum 法	修正 MITI法 (I)	クローズド ボトル法	修正 OECD スクリーニ ング法	マノメーター 呼吸測定法	
生分解性 指標	DOC 除去率	CO ₂ 発生率	BOD 除去率	BOD 除去率	DOC 除去率	BOD 除去率	ThIC 発生率
試験期間	28 日間	28 日間	28 日間	28 日間	28 日間	28 日間	28 日間
パスレベル	≧70%	≧60%	≧60%	≧60%	≧70%	≧60%	≧60%

460

461 4.10 生物濃縮性(BCF)

462 使用可否基準

463 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。

464 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」
465 のデータを暫定的に使用する。

466

467 キースタディ選定ルール

468 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。

- 469 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
 470 (ただし、高濃縮に相当する物質は審議会判断とする)。その際に定常状態の値を優先
 471 させる。利用可能な値が複数得られる場合は各濃度区における後半 3 回の算術平均濃縮
 472 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
 473 れている場合はその類推物質の BCF に置き換える。複数の物質から類推されている場
 474 合は最大値を用いる。
- 475 ② 化審法の判定結果が得られない場合、信頼性ランク「1」又は「2」に該当する最も
 476 信頼性の高いデータが 1 つであれば、それを選定する。
- 477 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複数ある場合は、
 478 最大値を選定する。
- 479 ④ BCF 測定値が得られない場合、次の回帰式による推定値を選定する。

480 ・ log Kow が 3.5 未満で、分配係数の試験結果により化審法に基づく濃縮性判定が行われ
 481 ている場合

482 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（カテゴリー I
 483 「単純受動拡散カテゴリー」に分類）の場合は（式 1）²⁰を用いる。対象物質が脂肪族
 484 炭化水素、芳香族炭化水素及びそのハロゲン化物以外の場合は（式 2）²¹を用いる。

485

$$486 \quad \log \text{BCF} = 1.05 \times \log \text{Kow} - 1.71 \quad (\text{式 1})$$

$$487 \quad \log \text{BCF} = 0.85 \times \log \text{Kow} - 0.70 \quad (\text{式 2})$$

488

489 ただし、log BCF の計算結果が 0.5 以下の場合は一律 0.5 とする²²。

490

491 ・ log Kow が 6 未満で、分配係数の試験結果により化審法に基づく濃縮性判定が行われて
 492 いない場合

493 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で log Kow が測定
 494 値の場合は上記（式 1）を用い、log Kow が推定値の場合は（式 3）¹⁶を用いる。それ以
 495 外の物質の場合は、上記（式 2）を用いる。

496

²⁰ 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」（平成 21 年 10 月 20 日）からの引用。

²¹ ECETOC (ECETOC (1998) Technical Report No. 74 QSARs in the Assessment of the Environmental Fate and Effects of Chemicals 4.1.4 Bioconcentration Factor (BCF) Table 15)、RIVM (RIVM (2000) RIVM report 679102050 The risk evaluation of difficult substances in USES 2.0 and EUSES, A decision tree for data gap filling of Kow, Koc and BCF 1.6 The estimation of the log bioconcentration factor in fish from the octanol/water coefficient of pesticides) 及び REACH-TGD (ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part III, Chapter 4 Use of (Quantitative) Structure Activity Relationships((Q)SARS) in Risk Assessment 4.5.2.1 QSARs for substances with logKow < 6 Table 6) において、logKow が 6 未満の物質の BCF を算出する式として紹介されている。

²² U.S. EPA (2005) Human Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities Appendix A-2 A2-2.13.4.1 Bioconcentration Factors for Fish (BCFfish) Equation A-22-27 には logKow < 1 のとき、logBCF = 0.5 とあり、BCF に換算すると 3.16 となる。

497 $\log \text{BCF} = 1.03 \times \log \text{Kow} - 1.48$ (式 3)

498

499 ・上記の回帰式を用いることができない場合は、BCFBAFWIN (EPI Suite) による推定値
500 を選定する。

501

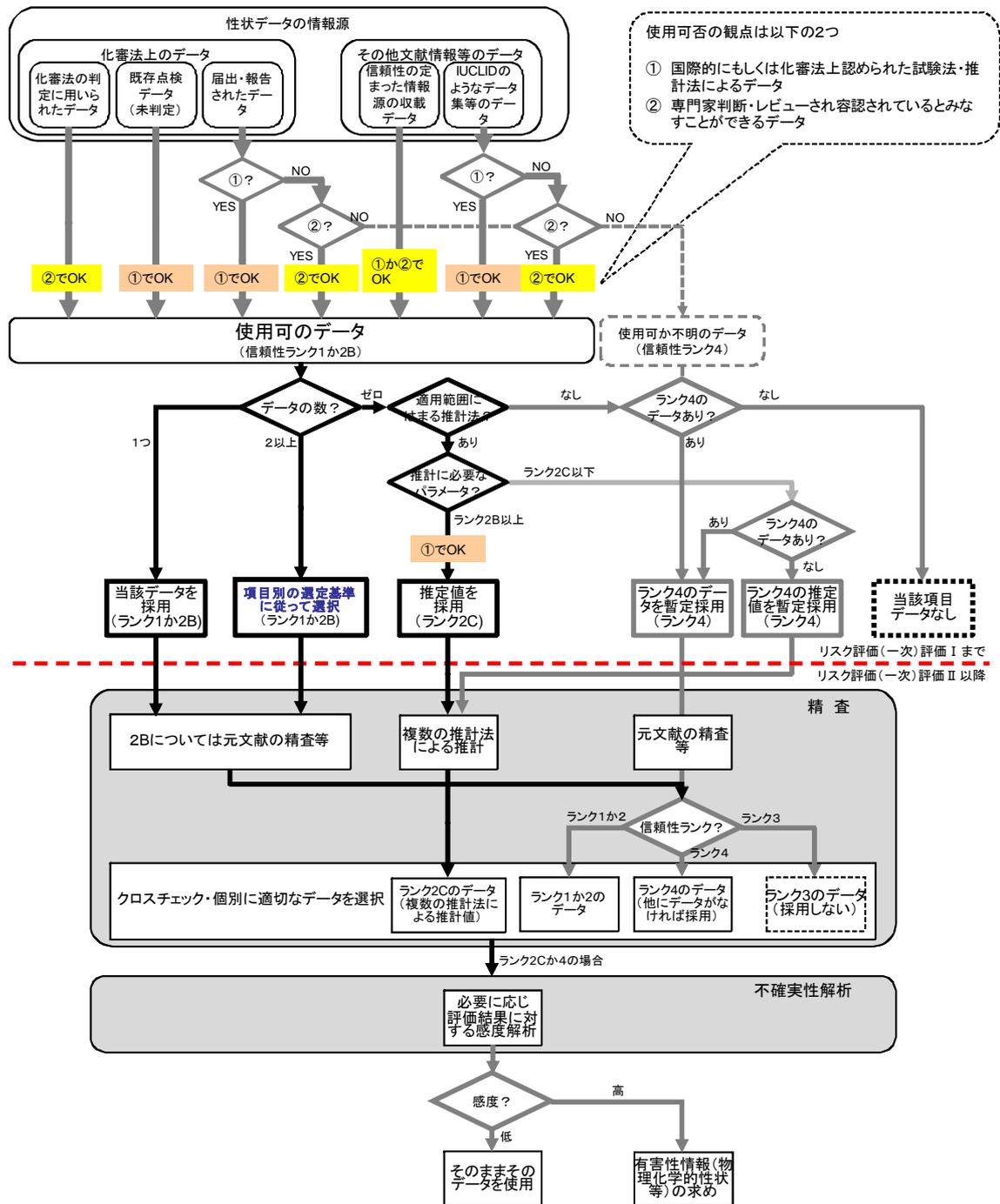
502 **5. スクリーニング評価・リスク評価における性状データ選定の全体像**

503 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。

505 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。

508

性状データ選定の全体像



509
510
511
512
513

図2 性状データ選定の概念的全体像

(参考 1)

「OECD-HPV 化学物質点検マニュアル」での信頼性の考え方

514
515
516
517
518
519
520
521
522
523
524
525
526
527
528
529
530
531
532
533
534
535
536
537
538
539
540
541
542
543
544
545
546
547
548
549

Klimisch らによる信頼性評価基準は、信頼性のないデータを取り除くため試験報告書の初期スクリーニングを支援する目的で Klimisch らにより開発された代表的なデータの信頼性を評価するための基準である。本基準は、生態毒性試験と健康への影響試験について信頼性をランク化する方法を導入しており、各ランクは以下の通り、ランク番号が小さいもの程信頼性が高く、信頼性ランク 1 または 2 と評価されるデータが採用できるものとしている。

信頼性ランク 4 に該当する二次文献・資料については、元文献・情報が信頼性ランク 1 または 2 である可能性を排除できないが、本選定方法においては原則として元文献・情報に遡及することなく二次文献・資料で判断する。なお、リスク評価(一次)評価Ⅱ以降において元文献・情報の精査を排除するものではなく、この段階において、必要に応じて元文献・情報の信頼性評価を行うものとする。

○信頼性ランク 1

「Reliable without restriction (信頼性あり (無制限))」

妥当性が確認されたまたは国際的に認められたテストガイドライン (GLP が望ましい) に従って実施された試験又はデータ、又は記載された試験項目が特定の (国レベルの) テストガイドラインに基づいているもの、又は記載されたすべての試験項目がテストガイドラインと密接に関連しているか同等である試験又はデータ。

○信頼性ランク 2

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

記載された試験項目は、特定のテストガイドラインと完全には一致していないが、当該データは十分許容されるもの、又は記載項目はテストガイドラインに含めることはではないが、詳細な記述がなされており科学的に許容される (ほとんどのものは GLP に従ってはいない) 試験又はデータ。

○信頼性ランク 3

「Not reliable (信頼性なし)」

測定系と試験物質の間に干渉が生じていたり、用いた生物/試験系への暴露が妥当ではなかったり (例えば、非生理的な投与経路)、許容できない方法に従って実施、又は作られ、記載が評価するには不十分であったり、専門家が判断する上でも説得力がない試験及びデータ。

550 ○信頼性ランク 4

551 「Not assignable (評価不能)」

552 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）
553 に羅列されているだけの試験及びデータ。

554

555 出典：

556 Klimisch, H.J., Andreae, E. and Tillmann, U. (1997) A systematic approach for evaluating the quality of
557 experimental and ecotoxicological data. Reg. Tox. Pharm., 25, 1-5.

558

(参考 2)

「Japan チャレンジスポンサーマニュアル」での信頼性ランク分類の目安

1. 既存情報に関する信頼性評価の事例

国の既存点検結果については、確立した試験方法で適切に実施されていますので、信頼性評価の必要はありません。このため、ここでは信頼性評価の対象となる既存の文献情報と、自社データのそれぞれについて、使用可能性があるか、無いかの判断の事例を説明します。信頼性評価の基準には、科学的に説明可能なものとして専門家が見て容認できるかどうかといった、専門的な判断を必要とする場合があります。各情報収集項目に対応した政府事務局の相談窓口が、必要な助言（必要に応じて専門家の紹介や打ち合わせ日程の設定等を含む）を行いますのでご相談ください。

(1) 使用可能性がある情報

Japan チャレンジプログラムにおいて使用可能と考えられる文献情報は、以下の通りです。

- ・元文献を入手した結果、当該試験が国際的に認められたテストガイドラインに従い、GLP で実施された試験報告であった場合（OECD 信頼性ランク 1 に該当）
 - ・元文献を入手した結果、当該試験が国際的に認められたテストガイドラインに準じて実施された試験報告であって、様式（テンプレート）に十分な情報が記載できるとともに、テストガイドラインからの逸脱について説明可能なもの。（OECD 信頼性ランク 2 に該当）
 - ・信頼性の定まったデータベース（メルクインデックス等）に収録されているデータ（OECD 信頼性ランク 2 に該当）
 - ・科学的に説明可能なもの（専門家の判断用として容認できる研究又はデータ）
- また、自社データについても、以下のとおり文献情報と同じような考え方で評価が出来ます。
- ・国際的に認められたテストガイドラインに従い、GLP で実施された試験報告。（OECD 信頼性ランク 1 に該当）
 - ・国際的に認められたテストガイドラインに準じて実施された試験報告であって、様式に十分な情報が記載できるとともに、テストガイドラインからの逸脱について説明可能なもの。（OECD 信頼性ランク 2 に該当）
 - ・雑誌等に投稿されて公表された試験報告であって、様式（テンプレート）に十分な情報が記載できるとともに、テストガイドラインからの逸脱について説明可能なもの。（OECD 信頼性ランク 2 に該当）
 - ・科学的に説明可能なもの（専門家の判断用として容認できる研究又はデータ）

(2) 使用可能性のない情報

使用可能性のない情報は以下の通りです。

- ・上記（1）以外の試験報告（OECD 信頼性ランク 3 に該当、例：不適切な実験方法で実

595 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
596 くデータ)

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

598

599 2. 信頼性が高いと認められる情報源

600 ここでは、信頼性の高いと認められる情報源について説明します。これら情報源に収載
601 されている情報については、原則として原文献又は元データの信頼性評価を要さないと思
602 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
603 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
604 ください。

605

606 (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

607 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
608 は以下のとおりです。

- 609 ・ The Merck Index – (物理化学的性状)
- 610 ・ Hawley's Condensed Chemical Dictionary – (物理化学的性状、用途)
- 611 ・ Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology – (用途)
- 612 ・ Patty's Industrial Hygiene and Toxicology – (ヒト健康影響)
- 613 ・ US EPA IRIS (Integrated Risk Information System) – (ヒト健康影響, NOAELs, RfDs,
614 RfCs and cancer slope factors)
- 615 ・ ATSDR (The Agency for Toxic Substances and Disease Registry) Toxicological Profiles
616 – (ヒト健康影響、用途、暴露情報)
- 617 ・ NTP (National Toxicology Program) Study Report – (ヒト健康影響、用途、暴露情
618 報)
- 619 ・ IARC (International Agency for Research on Cancer) Monographs on the Evaluation of
620 Carcinogenic Risks to Humans – (ヒト健康影響、用途、暴露情報)
- 621 ・ OSHA (Occupational Safety and Health Administration), ACGIH (American Conference
622 of Industrial Hygienists), AIHA (American Industrial Hygiene Association) – (労働環
623 境基準とその根拠)

624 その他の物理化学的性状に関する参考書

- 625 ・ Lide's CRC Handbook of Chemistry and Physics.
- 626 ・ Beilstein Handbook of Organic Chemistry.
- 627 ・ SAX's Dangerous Properties of Industrial Materials.
- 628 ・ Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards.
- 629 ・ Lange's Handbook of Chemistry.

²³ 原文に基づき修正・加筆した。

- 630 • Fire Protection Guide on Hazardous Materials (NFPA; National Fire Protection
- 631 Association).
- 632 • Dust Explosions in the Process Industry (R.K. Eckhoff).
- 633
- 634
- 635
- 636
- 637
- 638
- 639
- 640
- 641
- 642
- 643
- 644
- 645
- 646
- 647
- 648
- 649
- 650
- 651
- 652
- 653
- 654
- 655
- 656
- 657
- 658
- 659
- 660
- 661
- 662
- 663
- 664
- 665

(参考 3)

666

667

OECD テストガイドラインに準じた試験法²⁴

668

669 (1) 融点

670 ① JIS K 0064 (化学製品の融点及び溶融範囲測定方法)

671 ② JIS K 0065 (化学製品の凝固点測定方法)

672 ③ ISO 1392 (Method for the determination of the crystallizing point)

673 ④ ISO 2207 (Petroleum waxes - Determination of congealing point)

674 ⑤ ISO 3016 (Petroleum oils - Determination of pour point)

675 ⑥ EPA OPPTS 830.7200 (Melting Point / Melting Range)

676

677 (2) 沸点

678 ① JIS K 0066 (化学製品の蒸留試験方法)

679 ② ISO 918 (Volatile organic liquids for industrial use – Determination of distillation
680 characteristics)681 ③ ISO 3924 (Petroleum products – Determination of boiling range distribution – Gas
682 chromatography method)

683 ④ ISO 3405:1988 (Petroleum products – Determination of distillation characteristics)

684 ⑤ EPA OPPTS 830.7220 (Boiling Point / Boiling Range)

685

686 (3) 蒸気圧

687 ① 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)

688 ② 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)

689 ③ ISO 3007 (Petroleum products and crude petroleum – Determination of vapor pressure – Reid
690 method)

691 ④ EPA OPPTS 830.7950 (Vapor Pressure)

692

693 (4) 水に対する溶解度

694 ① EPA OPPTS 830.7840 (Water Solubility)

695 ② EPA OPPTS 830.7860 (Water Solubility Generator Column Method)

696

697 (5) 土壌吸着係数

698 ① EPA OPPTS 835.1110 (Activated Sludge Sorption Isotherm)

699 ② EPA OPPTS 835.1220 (Sediment and Soil Adsorption / Desorption Isotherm)

700 ③ ISO 18747 (Water quality: adsorption of substances on activated sludge-batch test using

²⁴ JIS、ISO 及び EPA を本選定基準として使用可能な試験法として位置付けた。

- 701 specific analytical method.)
702
703 (6) 解離係数 (酸解離定数)
704 OECD TG 112 (Dissociation Constants in Water)
705
706 (7) 1-オクタノールと水との間の分配係数
707 ① 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)
708 ② 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)
709 ③ EPA OPPTS 830.7550 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Shake Flask Method)
710 ④ EPA OPPTS 830.7560 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Generator Column Method)
711 ⑤ EPA OPPTS 830.7570 (Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Estimation By Liquid
712 Chromatography)
713
714 (8) 生物濃縮性
715 ① 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)
716 ② EPA OPPTS 850.1730 (Fish Bioconcentration Test)
717

(参考 4)

718

719

単位の換算

720

721 算術平均値の算出等を行う場合、単位変換は次式に従う。

722 ① 温度の換算²⁵

723 $^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow \text{K} : T(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273.15$

724 $^{\circ}\text{C} \Leftrightarrow ^{\circ}\text{F} : T(^{\circ}\text{C}) = 5/9 [t(^{\circ}\text{F}) - 32]$

725 ② 圧力の換算²⁶

726 $\text{mmHg} \Leftrightarrow \text{Pa} : 1\text{Torr}(\text{mmHg}) = 1.333 \times 10^2 \text{ Pa}$

727 $\text{気圧} \Leftrightarrow \text{Pa} : 1 \text{ 気圧} = 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$

728 ③ 水に対する溶解度の換算

729 水の比重は 1.000 とし計算する。

²⁵ OECD テストガイドライン 102 から引用

²⁶ OECD テストガイドライン 103 から引用 (一部修正)