

既存化学物質審査シート(良分解性等・人健康影響・生態影響)

(平成21年12月18日開催)

官報公示 整理番号	CAS No.	物質名称	判定結果		頁
			人健康影響	生態影響	
2-140	75-50-3	トリメチルアミン	二監相当		1
2-186	75-59-2	テトラメチルアンモニウムヒドロキシド	二監相当		3
2-1065	79-39-0	メタクリルアミド	二監相当		5
2-608	88-09-5	2-エチル酪酸	二監相当		7
3-1183	90-02-8	2-ヒドロキシベンズアルデヒド	二監相当		9
5-56	97-99-4	テトラメチルフルフリルアルコール	二監相当		11
3-2259	101-83-7	ジシクロヘキシルアミン	二監相当		13
2-235	110-63-4	1,4-ブタンジオール	二監相当		15
3-959	118-79-6	2,4,6-トリブロモフェノール	二監相当		17
3-500	123-07-9	4-エチルフェノール	二監相当		19
2-1514	126-98-7	メタクリロニトリル	二監相当		21
2-1291 2-2709	683-10-3	N,N-ジメチル-N-ドデシルグリシン	二監相当		23
2-1044	868-77-9	メタクリル酸2-ヒドロキシエチルエステル	二監相当		25
2-2583	2439-35-2	アクリル酸2-(ジメチルアミノ)エチルエステル	二監相当		27
2-1047	2867-47-2	2-(ジメチルアミノ)エチルメタクリラート	二監相当		29
2-798	111-82-0	ドデカン酸メチル		三監相当	31
2-66 2-68	111-85-3	1-クロロオクタン		三監相当	32
2-176 2-183	124-28-7	N,N-ジメチル-n-オクタデシルアミン		三監相当	33
2-814 2-827 2-2503	93-83-4	N,N-ビス(2-ヒドロキシエチル)-オレアミド		三監相当	34
2-8	111-65-9	オクタン		三監相当	35
2-27	112-41-4	1-ドデセン		三監相当	36
5-3732	52829-07-9	デカン二酸ビス(2,2,6,6-テトラメチル-4-ピペリジニル)		三監相当	37

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-140	CAS No.	75-50-3
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名称：トリメチルアミン 分子量：59.11 分子式：C₃H₉N</p> <div style="text-align: center;"> </div>		
用途	-		
製造及び 輸入数量	100 t 以上		
外観	無色透明気体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	<p>陰性 純度 30.8 % (水溶液). 溶媒 (注射用水-溶解). TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 純度換算有り* 1250 μg/plate まで実施した用量設定試験試験の結果を参考に以下の濃度まで実施. (本試験 I) -S9mix 群 : 1250 μg/plate* (最高用量で菌の生育阻害) +S9mix 群 : 1250 μg/plate* (TA1535, TA1537 : 625 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (TA100 : 最高用量で菌の生育阻害) 5000 μg/plate* (TA98 : 1250 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (WP2uvrA : 2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (本試験 II) -S9mix 群 : 1250 μg/plate* (最高用量で菌の生育阻害) +S9mix 群 : 1250 μg/plate* (TA1535, TA1537 : 625 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (TA100 : 最高用量で菌の生育阻害) 5000 μg/plate* (TA98 : 1250 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (WP2uvrA : 2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害)</p>		
染色体 異常	<p>陽性 D20=0.474mg/mL (-S9mix 群 : 構造異常) ±S9mix 群において構造異常の誘発. 純度 30.8 % (水溶液). 溶媒 (生理食塩液-溶解). CHL/1U. 純度換算有り* 0.591mg/mL (10mM) まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. (本試験) -S9mix 群 : 0.591mg/mL* (10mM) +S9mix 群 : 0.591mg/mL* (50%以上細胞増殖抑制濃度) (確認試験) -S9mix 群 : 0.591mg/mL* (50%以上細胞増殖抑制濃度) +S9mix 群 : 0.591mg/mL* (50%以上細胞増殖抑制濃度)</p>		
反復投与 毒性・生 殖発生毒 性併合試 験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)IGS	
	投与方法	強制経口投与 溶媒 : 局方注射用水	
	純度	30.8% (水溶液)	
	用量	3 用量 (8, 40, 200 mg/kg/day)	
	死亡	本試験 (200 : 2/13♂ 1/13♀)	

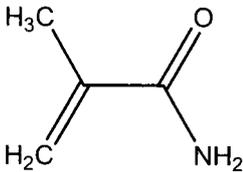
	NOEL	反復投与毒性：8 mg/kg/day 生殖発生毒性：200 mg/kg/day			
	推定根拠	反復投与毒性： 組織学的所見（精巣上体－管腔内細胞残屑：40 以上♂） 生殖発生毒性： 全群で特に毒性学的影響は認められていない			
	他の毒性	反復投与毒性： 一般状態（流涎：200♂♀、異常呼吸音：200♂） 血液生化学的検査（TP↓・Alb↓：200♂） 組織学的所見（前胃－扁平上皮過形成・粘膜びらん・潰瘍・出血・炎症性細胞浸潤・粘膜下織水腫・粘膜下織肉芽・漿膜肉芽、腺胃－粘膜びらん・出血：200♀♂、腺胃－粘膜炎症性細胞浸潤・粘膜下織水腫、精巣－精細管精母細胞/円形精子細胞変性・精細管伸長した精子細胞変性、精巣上体－管腔内精子変性/減少：200♂、腺胃－粘膜潰瘍、膈－上皮粘液細胞化：200♀） 生殖発生毒性： －			
	回復性	実施せず			
人健康影響判定根拠	Ames 試験は陰性であるが染色体異常試験は陽性であり、NOEL 8mg/kg/day であることから第二種監視化学物質相当。				
環境調査 ※1	媒体	実施年度	検体	検出範囲	検出下限値
	水質	S61	0/33	－	(3) μg/L
	底質	S61	4/27	0.13～0.63 μg/g-dry	(0.08) μg/g-dry
	魚類				
	大気	H3	1/48	150 ng/m ³	(150) ng/m ³
	その他				
備考	※1 S62、H4 年版「化学物質と環境」（環境省環境保健部環境安全課）				

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-186	CAS No.	75-59-2
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：テトラメチルアンモニウムヒドロキシド 分子量：91.03 分子式：C ₄ H ₁₃ NO <div style="text-align: center;"> $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{OH} \\ \quad \oplus \\ \text{H}_3\text{C}-\text{N}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ </div>		
用途	2-186 として中間物、溶剤、プロセス調節剤、工業用洗浄剤、接着剤用、写真・印刷等用、繊維剤、電気・電子材料、冷媒・熱媒、その他 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	2-186 として 10,000～100,000 t 未満 ^{*1}		
外観	無色透明液体（20%水溶液）		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	陰性 純度 20 %（水溶液）. 溶媒（注射用水－溶解）. TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 純度換算有り* 1250 μg/plate まで実施した用量設定試験試験の結果を参考に以下の濃度まで実施. （本試験Ⅰ） -S9mix 群：1250 μg/plate*（最高用量で菌の生育阻害） +S9mix 群：1250 μg/plate*（TA98, TA100, TA1535, TA1537 : 最高用量で菌の生育阻害） 5000 μg/plate*（WP2uvrA : 2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害） （本試験Ⅱ） -S9mix 群：1250 μg/plate*（最高用量で菌の生育阻害） +S9mix 群：1250 μg/plate*（TA98, TA100, TA1535, TA1537 : 最高用量で菌の生育阻害） 5000 μg/plate*（WP2uvrA : 2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害）		
染色体 異常	陰性 純度 20 %（水溶液）. 溶媒（注射用水－溶解）. CHL/IU. 純度換算有り* 0.91mg/mL（10mM）まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. -S9mix 群：0.91mg/mL*（10mM） +S9mix 群：0.91mg/mL*（10mM） 24 時間処理群：0.91mg/mL*（10mM）		
28 日間 反復投与	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)IGS	
	投与方法	強制経口投与 溶媒：局方注射用水	
	純度	20.19%（水溶液）	
	用量	3 用量（5, 10, 20 mg/kg/day）	
	死亡	なし	
	NOEL	5 mg/kg/day 未満	
	推定根拠	一般状態（流涎：5 以上♂10 以上♀） 絶対重量（心臓↓：5 以上♂）	
	他の毒性	相対重量（心臓↓：10 以上♂）	
回復性	問題なし		

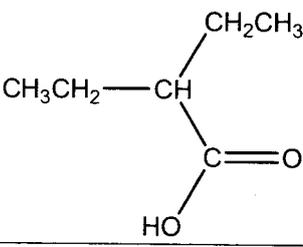
	備考	予備試験（急性経口投与毒性試験）において50及び100mg/kgの全例で間代性癌變が認められた。
人健康影響判定根拠		Ames試験及び染色体異常試験は陰性であり、NOEL 5mg/kg/day未満であることから第二種監視化学物質相当。
備考		※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績）

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-1065	CAS No.	79-39-0
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：メタクリルアミド 分子量：85.11 分子式：C ₄ H ₇ NO <div style="text-align: center;">  </div>		
用途	-		
製造及び 輸入数量	100 t 以上		
外観	白色結晶		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	陰性 純度 ≥99.5 %，溶媒（注射用水-溶解）. TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に以下の濃度まで実施. （本試験 I） - S9mix 群：5000 μg/plate + S9mix 群：5000 μg/plate （本試験 II） - S9mix 群：5000 μg/plate + S9mix 群：5000 μg/plate		
染色体 異常	陰性 純度 ≥99.5 %，溶媒（注射用水-溶解）. CHL/IU. 0.90mg/mL (10mM) まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. - S9mix 群：0.90mg/mL (10mM) + S9mix 群：0.90mg/mL (10mM) 24 時間処理群：0.90mg/mL (10mM) 48 時間処理群：0.90mg/mL (10mM)		
28 日間 反復投与	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)IGS	
	投与方法	強制経口投与 溶媒：局方精製水	
	純度	99.5%	
	用量	3 用量 (30, 100, 300 mg/kg/day)	
	死亡	予備試験 (600 : 3/5♂1/5♀)	
	NOEL	30 mg/kg/day 未満	
推定根拠	FOB (自発運動低下：30 以上♀100 以上♂)		

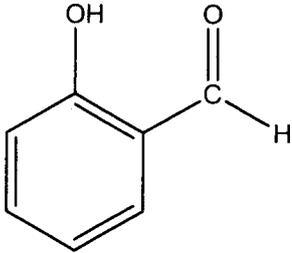
他の毒性	<p>一般状態（よろめき歩行：300♀♂、後肢の反転：300♀） FOB（歩行失調・筋緊張の低下：300♀♂、握力（前肢）↓：300♂） 体重↓：100以上♀300♂ 血液学的検査（Hct↓：300♀♂） 血液生化学的所見（TG↑：300♀） 剖検所見（膀胱－内腔拡張：300♀♂） 組織学的所見（小脳－小脳脚における軸索膨化、坐骨神経－神経線維の変性：300♀♂） 回復期：握力↓（後肢）：300♂♀、開脚幅低値：300♂、精巣－ステージIX, Xにおけるステップ19精子細胞のretention：300♂</p>
回復性	<p>体重↓、よろめき歩行、後肢の反転、歩行失調、筋緊張、自発運動低下、小脳－小脳脚における軸索膨化、坐骨神経－神経線維の変性</p>
人健康影響判定根拠	<p>Ames 試験及び染色体異常試験は陰性であるが、NOEL 30mg/kg/day 未満であり神経行動学的毒性と思われる重要な毒性学的所見が認められ、かつ、回復性も悪いことから第二種監視化学物質相当。</p>
備考	

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-608	CAS No.	88-09-5
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名称：2-エチル酪酸 分子量：116.16 分子式：C₆H₁₂O₂</p> <div style="text-align: center;">  </div>		
用途	2-608 として中間物、溶剤、プロセス調節剤、着色剤、工業用洗浄剤、家庭等洗浄剤、塗料用、着香・脱臭剤、繊維剤、樹脂添加剤、ゴム添加剤、潤滑・研削油、燃料等、その他 ※1		
製造及び 輸入数量	2-608 として 100,000～1,000,000 t 未満※1		
外観	無色液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	<p>陰性 純度 99.2%。溶媒 (DMSO-溶解). TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に以下の濃度まで実施. (本試験 I) - S9mix 群 : 5000 μg/plate + S9mix 群 : 5000 μg/plate (TA98, TA100, TA1535, TA1537: 最高用量で菌の生育阻害) (WP2uvrA) (本試験 II) - S9mix 群 : 5000 μg/plate + S9mix 群 : 5000 μg/plate (TA98, TA100, TA1535, TA1537: 最高用量で菌の生育阻害) (WP2uvrA)</p>		
染色体 異常	<p>陽性 D20 値=1.06mg/ml (24 時間処理群 : 構造異常) 24 時間処理群において構造異常の誘発. 純度 99.2%。溶媒 (DMSO-溶解). CHL/IU. 4.0mg/ml まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. - S9mix 群 : 1.6mg/mL + S9mix 群 : 1.6mg/mL (細胞毒性のため 0.8mg/mL まで観察) 24 時間処理群 : 1.6mg/mL (細胞毒性のため 1.6mg/mL は半分の観察細胞数で観察) ※細胞増殖抑制試験に先立ち、4.5mg/mL (溶媒 : DMSO) 及び 5.0mg/mL (溶媒 : アセトン) まで予備試験を実施。</p>		
反復投与 毒性・生 殖発生毒 性併合試 験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)IGS	
	投与方法	溶媒 : コーン油. 強制経口投与.	
	純度	99.2%.	
	用量	3 投与群 (10, 50, 250mg/kg).	
	死亡	予備試験 (瀕死 1000 : 1/5♂ [呼吸異常]) 本試験 (対照群 : 1/13 [分娩中難産のため])	

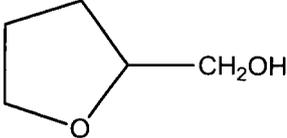
	NOEL	反復投与毒性：10 mg/kg/day 生殖発生毒性：10 mg/kg/day
	推定根拠	反復投与毒性： 血液学的検査（WBC↓：50以上♂） 生殖発生毒性： 分娩状態異常：50以上♀
	他の毒性	反復投与毒性： 血液学的検査（plt↓：250♂） 絶対重量（腎↑：250♀） 相対重量（腎↑：250♀♂） 生殖発生毒性： 生児出産率↓・出生率↓・生存児数（哺育0日及び4日）↓：250
	回復性	実施せず
人健康影 響判定根 拠	Ames 試験は陰性であるが染色体異常試験は陽性であり、NOEL 10mg/kg/day であるこ とから第二種監視化学物質相当。	
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績）	

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	3-1183	CAS No.	90-02-8
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：2-ヒドロキシベンズアルデヒド 分子量：122.12 分子式：C ₇ H ₆ O ₂		
			
用途	3-1183 として中間物 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	3-1183 として 1,000~100,000 t 未満 ^{*1}		
外観	淡黄色液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	陰性 純度≥95%. 溶媒 (DMSO-溶解). プレート法. TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. (本試験 I) -S9mix 群：500 μg/plate (TA100：最高用量で菌の生育阻害) 1000 μg/plate (TA1537：500 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (TA98, TA1535：最高用量で菌の生育阻害) 4000 μg/plate (WP2uvrA：最高用量で菌の生育阻害) +S9mix 群：500 μg/plate (TA100：最高用量で菌の生育阻害) 2000 μg/plate (TA98, TA1535, TA1537：最高用量で菌の生育阻害) 4000 μg/plate (WP2uvrA：最高用量で菌の生育阻害) (本試験 II) -S9mix 群：500 μg/plate (TA100：最高用量で菌の生育阻害) 1000 μg/plate (TA98, TA1535, TA1537：最高用量で菌の生育阻害) 4000 μg/plate (WP2uvrA：最高用量で菌の生育阻害) +S9mix 群：500 μg/plate (TA100：最高用量で菌の生育阻害) 2000 μg/plate (TA1535：1000 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (TA98, TA1537：最高用量で菌の生育阻害) 4000 μg/plate (WP2uvrA：最高用量で菌の生育阻害)		

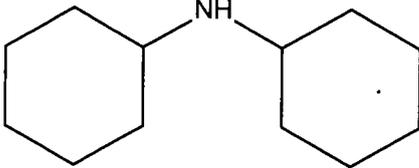
染色体異常	陽性 D20 値=0.025mg/ml (+S9mix 群：数的異常) ±S9mix 群及び 24 時間処理群において構造異常の誘発、+S9mix 群及び 48 時間処理群において数的異常の誘発。 純度≥95.0%。溶媒 (DMSO-溶解)。CHL/IU。 1.2mg/ml (10mM) まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施。 -S9mix 群：0.2mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度) +S9mix 群：0.2mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度) 24 時間処理群：0.02mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度) 48 時間処理群：0.02mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度)	
反復投与 毒性・生殖発生 毒性併合試験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)
	投与方法	溶媒：オリーブ油。強制経口投与。
	純度	99.3%。
	用量	4 投与群 (2.5, 10, 40, 160mg/kg)。
	死亡	予備試験 (200 : 1/5♂2/5♀、400 : 5/5♂4/5♀) 本試験 (40 : 1/12♀、160 : 1/12♀)
	NOEL	反復投与毒性：10 mg/kg/day 生殖発生毒性：40 mg/kg/day
	推定根拠	反復投与毒性： 組織学的所見 (肝-細胞内グリコーゲン量↑：40 以上♀、肝-小葉周辺脂肪化減少：40 以上♂) 生殖発生毒性： 哺育 4 日までの全児死亡：160♀ 新生児生存率↓：160 低体重 (哺育 0 日)、体重増加抑制 (哺育 4 日)：160
他の毒性	反復投与毒性： 血液学的検査 (PT↑：160♂) 血液生化学的所見 (A/G↑・Alb↑：160♂) 相対重量 (肝臓↑・卵巣↓：160♀) 絶対重量 (肝臓↑・卵巣↓：160♀) 生殖発生毒性： —	
回復性	実施せず	
人健康影響判定根拠	Ames 試験は陰性であるが染色体異常試験は陽性であり、NOEL 10mg/kg/day であることから第二種監視化学物質相当。	
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成 19 年実績)	

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	5-56	CAS No.	97-99-4
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：テトラヒドロフルフリルアルコール 分子量：102.13 分子式：C ₅ H ₁₀ O ₂		
			
用途	5-56 として工業用洗浄剤、塗料用、樹脂添加剤 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	5-56 として 1,000～100,000 t 未満 ^{*1}		
外観	無色液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	陰性 純度 99.5%。溶媒（注射用水－溶解）。 TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA/pKM101。 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施。 （本試験Ⅰ） - S9mix 群：5000 μg/plate + S9mix 群：5000 μg/plate （本試験Ⅱ） - S9mix 群：5000 μg/plate + S9mix 群：5000 μg/plate		
染色体 異常	陰性 純度 99.5%。溶媒（生理食塩液－溶解）。CHL/IU。 1.03mg/ml (10mM) まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施。 - S9mix 群：1.03mg/mL (10mM) + S9mix 群：1.03mg/mL (10mM) 24 時間処理群：1.03mg/mL (10mM)		
28 日間 反復投与 毒性試験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)IGS	
	投与方法	強制経口投与 溶媒：局方精製水	
	純度	99.5 %	
	用量	4 投与群 (10, 40, 150, 600 mg/kg/day)	
	死亡	なし	
	NOEL	40 mg/kg/day	
	推定根拠	一般状態（自発運動亢進：150 以上♀600♂） 血液生化学的検査（TP↓：150 以上♂600♀） 相対重量（下垂体↓：150 以上♀） 組織学的所見（精巣－精上皮細胞壊死・脾－赤脾髄萎縮・皮膜炎症：150 以上♂）	

	他の毒性	<p>体重↓：600♂、摂餌量↓：600♂ 一般状態（自発運動低下・腹臥姿勢：600♂♀） FOB（後肢握力↓：600♂） 尿検査（pH↓：600♂） 血液学的検査（WBC↓・Plt↓・PT↑・MCH↓・MCHC↓：600♂♀） 血液生化学的検査（Alb ↓・Ca ↓：600♂♀、TG ↓・BUN ↑・Na ↓：600♂） 絶対重量（胸腺↓・下垂体↓：600♂♀） 相対重量（胸腺↓：600♂♀、腎↑：600♀） 組織学的所見（胸腺－萎縮：600♂♀） 精巣－精子形成サイクル検査（精子細胞/セルトリ細胞↓：600 [ステージII-III・V・XII]）</p>
	回復性	<p>TP ↓、BUN ↑、Ca ↓、胸腺 ↓、精巣－精上皮細胞壊死、精巣－精子形成サイクル検査（パテキン期精母細胞・精子細胞/セルトリ細胞↓：600 [ステージII-III・V]）</p>
人健康影響判定根拠	<p>Ames 試験及び染色体異常試験は陰性であるが、NOEL 40mg/kg/day であり神経行動学的所見及び毒性学的に重要な変化が認められることから第二種監視化学物質相当。</p>	
備考	<p>※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績）</p>	

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	3-2259	CAS No.	101-83-7
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名称：ジシクロヘキシルアミン 分子量：181.31 分子式：C₁₂H₂₃N</p> 		
用途	3-2259 として中間物、プロセス調節剤、ゴム添加剤、潤滑・研削油、水処理剤、その他 ※1		
製造及び 輸入数量	3-2259 として 10,000~100,000 未満※1		
外観	無色液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	<p>陰性 純度 99.63%. 溶媒 (アセトン-溶解). プレート法 (-S9mix 群のみ). TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. (本試験) -S9mix 群 : 2500 μg/plate (最高用量で菌の生育阻害) +S9mix 群 : 2500 μg/plate (最高用量で菌の生育阻害) (確認試験) -S9mix 群 : 2500 μg/plate (1500 μg/plate 以上で菌の生育阻害)</p>		
染色体 異常	<p>陽性 D20=0.96mg/mL (+S9mix 群 : 構造異常) ±S9mix 群において、構造異常の誘発. 純度 99.63%. 溶媒 (アセトン-溶解). CHL/IU. 1.4mg/ml まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. -S9mix 群 : 1.0mg/mL (細胞毒性のため 0.6mg/mL 観察) +S9mix 群 : 1.0mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度) 24 時間処理群 : 0.5mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度) 48 時間処理群 : 0.5mg/mL (細胞毒性のため 0.3mg/ml まで観察)</p>		
28 日間 反復投与 毒性試験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)	
	投与方法	強制経口投与 溶媒 : コーン油	
	純度	99.63%	
	用量	3 投与群 (20, 70, 200 mg/kg/day)	
	死亡	予備試験 (250 : 4/5♂, 500 : 5/5♂) 本試験 (対照群 : 1/13♂, 200 : 8/13♂8/13♀)	
	NOEL	20 mg/kg/day	
推定根拠	<p>一般状態 (流涎 : 70 以上♂♀, 痙攣 : 70 以上♂200♀) 血液学的検査 (Pi↑ : 70 以上♀200♂, Ca↑ : 70 以上♀) 絶対重量 (卵巣↓ : 70 以上♀)</p>		

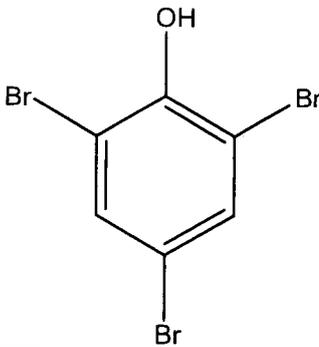
	他の毒性	体重↓：200♂♀、摂餌量↓：200♂ 一般状態（姿勢異常・自発運動低下・異常発声・呼吸異常・被毛の汚れ・散瞳：200♂♀、立毛：200♀） 血液学的検査（WBC↑：200♀） 血液学的検査（ALP↑：200♀） 絶対重量（副腎↑：200♂♀） 相対重量（副腎↑：200♂♀、卵巢↓：200♀）
	回復性	Pi↑、肝↓
人健康影響判定根拠	Ames 試験は陰性であるが染色体異常試験は陽性であり、NOEL 20mg/kg/day であることから第二種監視化学物質相当。	
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績）	

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-235	CAS No.	110-63-4
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：1,4-ブタンジオール 分子量：90.12 分子式：C ₄ H ₁₀ O ₂ 		
用途	2-235 として中間物、溶剤、塗料用、接着剤用、樹脂添加剤 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	2-235 として 100,000～1,000,000 t 未満 ^{*1}		
外観	無色透明液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	陰性 純度 99.8%. 溶媒 (注射用水-溶解). TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. (本試験 I) - S9mix 群 : 5000 μg/plate + S9mix 群 : 5000 μg/plate (本試験 II) - S9mix 群 : 5000 μg/plate + S9mix 群 : 5000 μg/plate		
染色体 異常	陰性 純度 99.8%. 溶媒 (注射用水-溶解). CHL/IU. 0.90mg/ml(10mM)まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. - S9mix 群 : 0.90mg/mL (10mM) + S9mix 群 : 0.90mg/mL (10mM) 24 時間処理群 : 0.90mg/mL (10mM) 48 時間処理群 : 0.90mg/mL (10mM)		
反復投与 毒性・生 殖発生毒 性併合試 験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)	
	投与方法	強制経口投与 溶媒：局方注射用水	
	純度	98.0%	
	用量	3 投与群 (200, 400, 800 mg/kg/day)	
	死亡	なし	
	NOEL	反復投与毒性：200 mg/kg/day 未満 生殖発生毒性：400 mg/kg/day	
推定根拠	反復投与毒性： 一般状態 (活動性の増加：200 以上♂♀) 血液生化学的検査 (Glu ↓：200 以上♂) 尿検査 (血色素：200 以上♂♀) 生殖発生毒性： 新生児体重 [哺育 4 日] ↓：800♂♀		

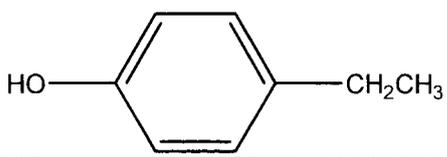
	他の毒性	反復投与毒性： 体重↓：400以上♀800♂、摂餌量↓：400以上♂♀ 一般状態（活動性の低下・腹臥位：400以上♂♀、昏睡・眼球突出・流涎： 800♂♀） 血液学的検査（Hgb↓：400以上♂、Hct↓：800♂） 病理組織学的検査（膀胱－びまん性粘膜上皮過形成・粘膜固有層の線維化： 400以上♀♂、胸腺－萎縮・出血：400以上♀、脾臓－ うっ血：400以上♀800♂） 生殖発生毒性： －			
	回復性	実施せず			
人健康影響判定根拠	Ames試験は陰性であるが染色体異常試験は陰性であるが、NOEL 200mg/kg/day未満であり神経行動毒性と思われる毒性学的に重要な所見が認められることから第二種監視化学物質相当。				
環境調査 ※2	媒体	実施年度	検体	検出範囲	検出下限値
	水質	S61	0/24	－	(2) $\mu\text{g/L}$
	底質	S61	0/24	－	(0.09) $\mu\text{g/g-dry}$
	魚類				
	大気				
その他					
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績） ※2 S62年版「化学物質と環境」（環境省環境保健部環境安全課）				

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	3-959	CAS No.	118-79-6
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名称：2,4,6-トリブロモフェノール 分子量：330.82 分子式：C₆H₃OBr₃</p> 		
用途	3-959 として中間物、樹脂添加剤 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	3-959 として 10,000～100,000 t 未満 ^{*1}		
外観	白色粉末		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	<p>陰性 純度 99.8%. 溶媒 (DMSO-溶解). TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. (本試験 I) -S9mix 群 : 500 μg/plate (TA98, TA100, TA1535 : 最高用量で菌の生育阻害) 1000 μg/plate (TA1537 : 500 μg/plate 以上で菌の生育阻害) 5000 μg/plate (WP2uvrA : 2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害) +S9mix 群 : 500 μg/plate (TA100, TA1535, TA1537 : 最高用量で菌の生育阻害) 1000 μg/plate (TA98 : 最高用量で菌の生育阻害) 5000 μg/plate (WP2uvrA : 2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (本試験 II) -S9mix 群 : 500 μg/plate (TA98, TA100, TA1535 : 最高用量で菌の生育阻害) 1000 μg/plate (TA1537 : 500 μg/plate 以上で菌の生育阻害) 5000 μg/plate (WP2uvrA : 2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害) +S9mix 群 : 500 μg/plate (TA100, TA1535, TA1537 : 最高用量で菌の生育阻害) 1000 μg/plate (TA98 : 最高用量で菌の生育阻害) 5000 μg/plate (WP2uvrA : 2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害)</p>		
染色体 異常	<p>陽性 D20 値=0.10mg/mL (±S9mix 群 : 構造異常) ±S9mix 群で構造異常の誘発. 純度 99.8%. 溶媒 (DMSO-溶解). CHL/IU. 3.3mg/ml(10mM)まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. -S9mix 群 : 0.050mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度) +S9mix 群 : 0.10mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度) 24 時間処理群 : 0.10mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度) 48 時間処理群 : 0.050mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度)</p>		

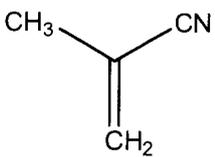
反復投与 毒性・生 殖発生毒 性併合試 験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)			
	投与方法	強制経口投与 溶媒：コーン油			
	純度	99.8%			
	用量	3投与群 (100, 300, 1000 mg/kg/day)			
	死亡	なし			
	NOEL	反復投与毒性：100 mg/kg/day 生殖発生毒性：300 mg/kg/day			
	推定根拠	反復投与毒性： 血液生化学的検査 (Cre ↑：300 以上♂) 組織学的所見 (腎-尿細管好塩基性化：300 以上♂) 生殖発生毒性： 4日生存率↓・体重↓[哺育0日・哺育4日]：1000♂♀			
他の毒性	反復投与毒性： 体重↓：1000♂♀ 血液生化学的検査 (TP↑・Alb↑・A/G↑・ALP↑・K↓・Cl↑：1000♂) 絶対重量 (胸腺↓：1000♂、肝↑：1000♂♀) 相対重量 (肝↑・腎↑・副腎↑：1000♂♀) 病理組織学的検査 (胸腺-萎縮、肝-肝細胞肥大、腎-管腔拡張・硝子円柱・ 乳頭壊死・リンパ球浸潤：1000♂、肝-マクロファージ 集簇：1000♂♀) 生殖発生毒性： -				
回復性	実施せず				
人健康影 響判定根 拠	Ames 試験は陰性であるが染色体異常試験は陽性であり、NOEL 100mg/kg/day であるこ とから第二種監視化学物質相当。				
環境調査 ※2	媒体	実施年度	検体	検出範囲	検出下限値
	水質	H17	15/18	0.0019~0.080 μg/L	(0.00087) μg/L
		H8	0/33	-	(0.35) μg/L
		S61	0/33	-	(0.006) μg/L
	底質	H8	0/33	-	(0.009) μg/g-dry
		S61	2/33	0.0015~0.0040 μg/g-dry	(0.0005) μg/g-dry
魚類					
大気	H16	6/6	0.03~0.14 ng/m ³	(0.02) ng/m ³	
その他					
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成19年実績) ※2 S62、H9、H17、H18 年版「化学物質と環境」(環境省環境保健部環境安全課)				

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	3-500	CAS No.	123-07-9
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名称：4-エチルフェノール 分子量：122.16 分子式：C₈H₁₀O</p> 		
用途	3-500 として中間物、塗料用、樹脂添加剤 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	3-500 として 1,000～10,000 t 未満 ^{*1}		
外観	白色結晶		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	<p>陰性 純度 98.328%．溶媒（DMSO-溶解）． TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施。 （本試験Ⅰ） -S9mix 群：2000 μg/plate (TA98, TA100, TA1535, TA1537 : 1000 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (WP2uvrA : 最高用量で菌の生育阻害) +S9mix 群：2000 μg/plate (最高用量で菌の生育阻害) （本試験Ⅱ） -S9mix 群：2000 μg/plate (TA98, TA100, TA1535, TA1537 : 1000 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (WP2uvrA : 最高用量で菌の生育阻害) +S9mix 群：2000 μg/plate (最高用量で菌の生育阻害)</p>		
染色体 異常	<p>陽性 D20 値=0.077mg/mL (24 時間処理群：構造異常) +S9mix 群及び 24 時間処理群において構造異常の誘発。 純度 98.328%．溶媒（DMSO-溶解）．CHL/IU. 1.2mg/ml(10mM)まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施。 -S9mix 群：0.80mg/mL (細胞毒性のため 0.20mg/mL まで観察) +S9mix 群：0.30mg/mL (細胞毒性のため 0.075mg/mL まで観察) 24 時間処理群：0.30mg/mL (細胞毒性のため 0.075mg/mL まで観察)</p>		
28 日間 反復投与 毒性試験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)IGS	
	投与方法	強制経口投与 溶媒：オリーブ油	
	純度	98.3%	
	用量	3 投与群 (100, 300, 1000 mg/kg/day)	
	死亡	予備試験 (1000 : 1/5 ♀、2000 : 5/5 ♂/5/5 ♀)	
	NOEL	100 mg/kg/day	
	推定根拠	<p>相対重量 (肝↑ : 300 以上♂1000♀) 組織学的所見 (前胃-境界縁扁平上皮過形成 : 300 以上♂、前胃-扁平上皮過形成 : 300 以上♂1000♀)</p>	

他の毒性	体重↓：1000♂♀、摂餌量↓：1000♂♀ 一般状態（よろめき歩行・横臥・流涎：1000♂♀） 尿所見（尿量↑：1000♀） 血液生化学的検査（GPT↑：1000♂、 γ -GTP↑・cho↑：1000♀） 相対重量（腎↑：1000♂） 組織学的検査（食道－扁平上皮過形成、前胃－潰瘍・粘膜下織肉芽形成、腺胃－びらん：1000♀、前胃－境界縁びらん：1000♂、前胃－扁平上皮変性・粘膜下織水腫：1000♂♀）				
回復性	体重↓				
人健康影響判定根拠	Ames 試験は陰性であるが染色体異常試験は陽性であり、NOEL 100mg/kg/day であることから第二種監視化学物質相当。				
環境調査 ※2	媒体	実施年度	検体	検出範囲	検出下限値
	水質	S58	0/33	-	(0.06~0.3) μ g/L
	底質	S58	0/33	-	(0.001~0.02) μ g/g-dry
	魚類				
	大気				
	その他				
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績） ※2 S59年版「化学物質と環境」（環境省環境保健部環境安全課）				

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-1514	CAS No.	126-98-7
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：メタクリロニトリル 分子量：67.09 分子式：C ₄ H ₅ N <div style="text-align: center;">  </div>		
用途	—		
製造及び 輸入数量	100 t 以上		
外観	無色液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	—		
Ames	陰性 純度 99%. 溶媒 (DMSO-溶解). TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. (本試験 I) - S9mix 群 : 5000 μg/plate + S9mix 群 : 5000 μg/plate (本試験 II) - S9mix 群 : 5000 μg/plate + S9mix 群 : 5000 μg/plate		
染色体 異常	陽性 D20 値 = 0.090mg/mL (+S9mix 群 : 構造異常) +S9mix 群において構造異常の誘発. 純度 99%. 溶媒 (注射用水-溶解). CHL/IU. 0.67mg/ml(10mM)まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. -S9mix 群 : 0.67mg/mL (10mM) +S9mix 群 : 0.54mg/mL (細胞毒性のため 0.27mg/mL まで観察) 24 時間処理群 : 0.67mg/mL (10mM)		
反復投与 毒性・生 殖発生毒 性併合試 験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)IGS	
	投与方法	強制経口投与 溶媒：オリーブ油	
	純度	99%	
	用量	3 投与群 (7.5, 15, 30 mg/kg/day)	
	死亡	なし	
	NOEL	反復投与毒性：7.5 mg/kg/day 未満 生殖発生毒性：30 mg/kg/day	
推定根拠	反復投与毒性： 相対重量 (肝↑：7.5 以上♀30♂) 組織学的所見 (腺胃：びらん：7.5 以上♀) 生殖発生毒性： 全群で特に毒性学的影響は認められていない		

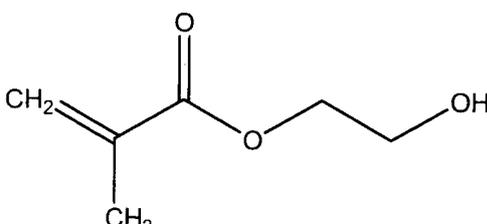
	他の毒性	反復投与毒性： 血液学的検査 (RBC↓・Hct↓・Hgb↓：30♂) 血液生化学的検査 (Bil↑：30♀、Cre↑：30♂) 絶対重量 (肝↑・脾↑：30♀) 相対重量 (脾↑：30♀) 組織学的所見 (脾—髓外造血：15以上♀) 生殖発生毒性： —				
	回復性	実施せず				
人健康影響判定根拠	Ames 試験は陰性であるが染色体異常試験は陽性であり、NOEL 7.5mg/kg/day 未満であることから第二種監視化学物質相当。					
環境調査 ※1	媒体	実施年度	検体	検出範囲	検出下限値	
	水質	S62	0/75	—	(0.7) μg/L	
	底質	S62	0/75	—	(0.014) μg/g-dry	
	魚類					
	大気	S62	0/61	—	(40) ng/m ³	
その他						
備考	※1 S63年版「化学物質と環境」(環境省環境保健部環境安全課)					

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-1291, 2-2709	CAS No.	683-10-3
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名称：N,N-ジメチル-N-ドデシルグリシン 分子量：271.25 分子式：C₁₆H₃₃NO₂</p> $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3(\text{CH}_2)_{11}-\text{N}^{\oplus}-\text{CH}_2\text{COO}^{\ominus} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$		
用途	2-1291 及び 2-2709 として工業用洗浄剤、家庭等洗浄剤、塗料用、繊維剤、その他 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	2-1291 として 10,000～100,000 t 未満 2-2709 として 1,000～10,000 t 未満 ^{*1}		
外観	淡黄色透明液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	<p>陰性 純度 27.1% (水溶液). 溶媒 (注射用水-溶解). TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA/pKM101. 純度換算有り* 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. (本試験 I) -S9mix 群 : 39.1 μg/plate* (TA98, TA1537 : 19.5 μg/plate 以上で菌の生育阻害) 78.1 μg/plate* (TA100, TA1535 : 39.1 μg/plate 以上で菌の生育阻害) 156 μg/plate* (WP2uvrA : 78.1 μg/plate 以上で菌の生育阻害) +S9mix 群 : 313 μg/plate* (TA100, TA1535 : 最高用量で菌の生育阻害) 625 μg/plate* (TA98, TA1537 : 313 μg/plate 以上で菌の生育阻害) 2500 μg/plate* (WP2uvrA : 1250 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (本試験 II) -S9mix 群 : 39.1 μg/plate* (TA98, TA1537 : 19.5 μg/plate 以上で菌の生育阻害) 78.1 μg/plate* (TA100, TA1535 : 39.1 μg/plate 以上で菌の生育阻害) 156 μg/plate* (WP2uvrA : 78.1 μg/plate 以上で菌の生育阻害) +S9mix 群 : 313 μg/plate* (TA100, TA1535 : 最高用量で菌の生育阻害) 625 μg/plate* (TA98, TA1537 : 313 μg/plate 以上で菌の生育阻害) 2500 μg/plate* (WP2uvrA : 1250 μg/plate 以上で菌の生育阻害)</p>		
染色体 異常	<p>陰性 純度 27.1% (水溶液). 溶媒 (蒸留水-溶解). CHL/IU. 純度換算有り* 0.5mg/ml まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. -S9mix 群 : 0.2mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度) +S9mix 群 : 0.3mg/mL (細胞毒性のため 0.3mg/mL は半分の観察細胞数で観察) 24 時間処理群 : 0.15mg/mL (細胞毒性のため 0.125mg/mL まで観察)</p>		
反復投与 毒性・生 殖発生毒 性併合試 験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)IGS	
	投与方法	強制経口投与 溶媒 : 局方注射用水	
	純度	27.1% (水溶液)	
	用量	3 群 (10, 60, 300 mg/kg/day)	
死亡	予備試験 (1000 : 3/3♂3/3♀) 本試験 (300 : 2/17♀)		

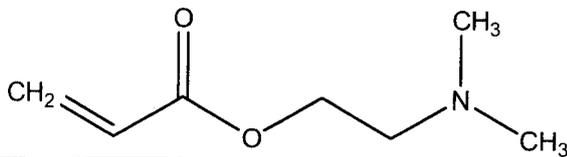
	NOEL	反復投与毒性：10 mg/kg/day 生殖発生毒性：60 mg/kg/day
	推定根拠	反復投与毒性： 組織学的所見（腎－尿細管変性／壊死：60以上♀、腎－腎盂上皮過形成、膀胱－粘膜上皮増殖：60以上♂♀） 生殖発生毒性： 妊娠期間延長・出産児数↓：300、出生児死亡：300
	他の毒性	反復投与毒性： 血液生化学的検査（BUN↑：300♂♀、Ca↑：300♀） 組織学的所見（前胃－び慢性炎症性細胞浸潤・水腫・びらん・角化亢進・扁平上皮過形成・錯角化：300♂♀、腎－尿細管好塩基性化：300♀） 生殖発生毒性： －
	回復性	膀胱－粘膜上皮増殖
人健康影響判定根拠	Ames 試験及び染色体異常試験は陰性であるが、NOEL 10mg/kg/day であることから第二種監視化学物質相当。	
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績）	

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-1044	CAS No.	868-77-9
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名称：メタクリル酸 2-ヒドロキシエチルエステル 分子量：130.14 分子式：C₆H₁₀O₃</p> 		
用途	2-1044 として中間物、溶剤、塗料用、繊維剤、その他 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	2-1044 として 100,000～1,000,000 t 未満 ^{*1}		
外観	無色透明液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	<p>陰性 純度 97.6%. 溶媒 (注射用水-溶解). TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA. 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. (本試験 I) -S9mix 群 : 5000 μg/plate +S9mix 群 : 5000 μg/plate (本試験 II) -S9mix 群 : 5000 μg/plate +S9mix 群 : 5000 μg/plate</p>		
染色体 異常	<p>陽性 D20=0.20mg/mL (48 時間処理群 : 構造異常) +S9mix 群及び 24 時間並びに 48 時間処理群において構造異常の誘発、-S9mix 群 及び 48 時間処理群において数的異常の誘発. 純度 97.6%. 溶媒 (注射用水-溶解). CHL/IU. 4.0mg/ml まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施. -S9mix 群 : 1.3mg/mL (10mM) +S9mix 群 : 1.3mg/mL (10mM) 24 時間処理群 : 1.3mg/mL (10mM) 48 時間処理群 : 1.3mg/mL (細胞毒性のため 0.65mg/mL まで観察)</p>		
反復投与 毒性・生 殖発生毒 性併合試 験	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)	
	投与方法	強制経口投与 溶媒 : 注射用水	
	純度	97.6 %	
	用量	4 投与群 (30, 100, 300, 1000 mg/kg/day)	
	死亡	1000♂ (1/12)、1000♀ (6/12)	
	NOEL	反復投与毒性 : 30 mg/kg/day 未満 生殖発生毒性 : 1000 mg/kg/day	

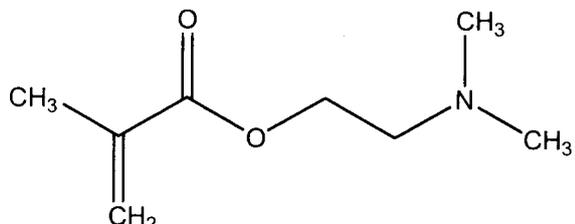
	推定根拠	反復投与毒性： 血液生化学的検査 (BUN↑：30 以上♂) 生殖発生毒性： 全群で特に毒性学的影響は認められていない			
	他の毒性	反復投与毒性： 体重↓：1000♂♀、摂餌量↓：1000♂♀ 一般状態 (流涎：1000♂♀、自発運動低下・腹臥・流涙・被毛の汚れ・表皮 温降下・呼吸緩徐：1000♀) 血液生化学的検査 (TG↓・K↑・Cl↑・Pi↑：1000♂) 絶対重量 (腎↑：100 以上♀) 相対重量 (腎↑：100 以上♂1000♀) 病理組織学的所見 (腎尿管拡張・集合管拡張：1000♂) 生殖発生毒性： -			
	回復性	実施せず			
人健康影響判定根拠	Ames 試験は陰性であるが染色体異常試験は陽性であり、NOEL 30mg/kg/day 未満であることから第二種監視化学物質相当。				
環境調査 ※2	媒体	実施年度	検体	検出範囲	検出下限値
	水質	H11	3/27	0.12~051 μg/L	(0.025) μg/L
	底質	H11	0/27	-	(0.0014) μg/g-dry
	魚類				
	大気				
その他					
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成19年実績) ※2 H12年版「化学物質と環境」(環境省環境保健部環境安全課)				

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-2583	CAS No.	2439-35-2
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名称：アクリル酸 2- (ジメチルアミノ) エチルエステル 分子量：143.18 分子式：C₇H₁₃NO₃</p> 		
用途	-		
製造及び 輸入数量	100 t 以上		
外観	無色透明液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	<p>陽性 比活性値=10.6rev./mg (+S9mix 群：TA98) +S9mix 群の TA98 で対照の 2 倍を超える変異コロニーの誘発。 純度 99.9%。溶媒 (注射用水-溶解)。 TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA。 5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施。 (本試験 I) -S9mix 群：2500 μg/plate (TA98, TA1537：最高用量で菌の生育阻害) 5000 μg/plate (TA100, TA1535, WP2uvrA：最高用量で菌の生育阻害) +S9mix 群：5000 μg/plate (TA1535：2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (TA1537：最高用量で菌の生育阻害) (TA98, TA100, WP2uvrA) (本試験 II) -S9mix 群：2500 μg/plate (TA1537：1250 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (TA98：最高用量で菌の生育阻害) 5000 μg/plate (TA1535：2500 μg/plate 以上で菌の生育阻害) (TA100, WP2uvrA：最高用量で菌の生育阻害) +S9mix 群：5000 μg/plate (TA1535, TA1537：最高用量で菌の生育阻害) (TA98, TA100, WP2uvrA) (確認試験) +S9mix 群：5000 μg/plate (TA98)</p>		
染色体 異常	<p>陽性 D20=0.014mg/mL (-S9mix 群：構造異常) すべての群において構造異常及び数的異常の誘発。 純度 99.9%。溶媒 (注射用水-溶解)。CHL/IU。 1.4mg/ml まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施。 -S9mix 群：0.08mg/mL (細胞毒性のため 0.01mg/mL まで観察) +S9mix 群：0.4mg/mL (細胞毒性のため 0.05mg/mL まで観察) 24 時間処理群：0.12mg/mL (細胞毒性のため 0.06mg/mL まで観察) 48 時間処理群：0.12mg/mL (細胞毒性のため 0.06mg/mL まで観察)</p>		
反復投与 毒性・生	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)	
	投与方法	強制経口投与 溶媒：コーン油	

殖発生毒性併合試験	純度	99.9%
	用量	3投与群 (4, 20, 100 mg/kg/day)
	死亡	100♀ : 2/12 [肺出血]
	NOEL	反復投与毒性 : 4 mg/kg/day 生殖発生毒性 : 100 mg/kg/day
	推定根拠	反復投与毒性 : 病理組織学的検査 (前胃-粘膜過形成・炎症性細胞浸潤・潰瘍 : 20以上♂ 100♀) 生殖発生毒性 : 全群で特に毒性学的影響は認められていない
他の毒性	反復投与毒性 : 一般状態 (流涎 : 100♂♀) 血液生化学的検査 (Ret↑・Plt↑・Lymp↓・Seg↑ : 100♂) 血液学的検査 (Alb↓ : 100♂) 相対重量 (胸腺↓ : 100♀) 絶対重量 (胸腺↓ : 100♀) 病理組織学的所見 (十二指腸リンパ節-形質細胞の増生 : 100♂♀、胸腺- 退縮 : 100♀) 生殖発生毒性 : -	
回復性	実施せず	
人健康影響判定根拠	Ames 試験及び染色体異常試験は陽性であり、NOEL 4mg/kg/day であることから第二種監視化学物質相当。	
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成19年実績)	

既存化学物質審査シート

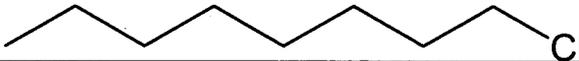
官報公示 整理番号	2-1047	CAS No.	2867-47-2
判定案	人健康影響 第二種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名称：2- (ジメチルアミノ) エチルメタクリラート</p> <p>分子量：157.22</p> <p>分子式：C₈H₁₅NO₂</p> <div style="text-align: center;">  </div>		
用途	2-1047 として中間物、塗料用、繊維剤、潤滑・研削油、水処理剤 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	2-1047 として 10,000~100,000 t 未満 ^{*1}		
外観	無色透明液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
Ames	<p>陽性</p> <p>比活性値=3.6rev./mg (-S9mix 群：TA98)</p> <p>-S9mix 群の TA1537 で対照の 2 倍を超える変異コロニーの誘発。</p> <p>純度 99.9%。溶媒 (蒸留水-溶解)。</p> <p>TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2 uvrA.</p> <p>5000 μg/plate まで実施した用量設定試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施。</p> <p>(本試験 I)</p> <p>-S9mix 群：5000 μg/plate (TA98, TA1537：最高用量で菌の生育阻害)</p> <p>(TA100, TA1535, WP2uvrA)</p> <p>+S9mix 群：5000 μg/plate</p> <p>(本試験 II)</p> <p>-S9mix 群：5000 μg/plate (TA98, TA1537：最高用量で菌の生育阻害)</p> <p>(TA100, TA1535, WP2uvrA)</p> <p>+S9mix 群：5000 μg/plate</p> <p>(確認試験)</p> <p>-S9mix 群：5000 μg/plate (TA98, TA1537：3500 μg/plate 以上で菌の生育阻害)</p>		
染色体 異常	<p>陽性</p> <p>D20=0.19mg/mL (-S9mix 群：構造異常)</p> <p>±S9mix 群において構造異常の誘発。</p> <p>純度 99.9%。溶媒 (蒸留水-溶解)。CHL/IU。</p> <p>5.0mg/ml まで実施した細胞増殖抑制試験の結果を参考に、以下の濃度まで実施。</p> <p>-S9mix 群：1.6mg/mL (細胞毒性のため 0.6mg/mL まで観察)</p> <p>+S9mix 群：1.6mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度)</p> <p>24 時間処理群：0.625mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度)</p> <p>48 時間処理群：0.625mg/mL (50%以上細胞増殖抑制濃度)</p>		
反復投与 毒性・生	動物種・系統	ラット Crj:CD(SD)IGS	
	投与方法	強制経口投与 溶媒：コーン油	
	純度	99.9 %	
殖発生毒 性併合試	用量	3 投与群 (40, 200, 1000 mg/kg/day)	
	死亡	対照群：1/12♀ [難産]、1000：3/12♀ [肺水腫]	

験	NOEL	反復投与毒性：40 mg/kg/day 生殖発生毒性：200 mg/kg/day
	推定根拠	反復投与毒性： 一般状態（流涎：200 以上♂1000♀） 血液学的検査（Hgb↓・Hct↓・Ret↑：200 以上♂） 生殖発生毒性： 同腹内全新生児死亡、体重↓・4 日生存率↓：1000
	他の毒性	反復投与毒性： 体重↓・摂餌量↓：1000♀ 一般状態（挙尾・痙攣：1000♂♀、間代性痙攣：1000♂） 尿検査（尿量↑：1000♂） 血液学的検査（RBC↓・MCV↓・MCH↓・WBC↑・Lymp↓：1000♂） 血液生化学的検査（BUN↑・Na↓：1000♂） 絶対重量（副腎↑：1000♀） 相対重量（肝↑：1000♂、腎↑：1000♂♀、副腎↑：1000♀） 組織学的所見（胃－水腫、前胃－び慢性粘膜増生・炎症性細胞浸潤、脳－赤核脊髄路領域神経線維変性、脊髄－背側後脊髄小脳路神経線維変性：1000♂♀、腎－好塩基性尿細管：1000♂、前胃－潰瘍、胸腺－萎縮：1000♀） 生殖発生毒性： —
	回復性	実施せず
人健康影響判定根拠	Ames 試験及び染色体異常試験は陽性であり、NOEL 40mg/kg/day であり、神経行動毒性と思われる毒性学的に重要な所見が認められることから第二種監視化学物質相当。	
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績）	

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-798	CAS No.	111-82-0
判定案	生態影響 第三種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：ドデカン酸メチル 		
用途	2-798 として中間物、溶剤、プロセス調節剤、家庭等洗浄剤、印刷インキ等、着香・消臭剤、繊維剤、樹脂添加剤、ゴム添加剤、皮革処理剤、潤滑・研削油、電気電子材料、燃料等、その他※ ¹		
製造及び 輸入数量	2-798 として 100,000~1,000,000 t 未満※ ¹		
外観	無色透明液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
藻類生長 阻害試験	生物種： <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> 試験法：化審法 TG (2003) 培養方式：振とう培養（密閉系） 純度：99.6% 試験濃度：設定濃度 0.038、0.075、0.15、0.30、0.60 mg/L 実測濃度 0.040、0.074、0.16、0.32、0.60 mg/L（ばく露開始時） 助剤：DMF 0.1 mL/L 72hEC50（実測値に基づく）=0.32 mg/L 72hNOEC（実測値に基づく）=0.040 mg/L		
ミジンコ 繁殖阻害 試験	生物種：オオミジンコ <i>Daphnia magna</i> 試験法：化審法 TG 試験方式：流水式 純度：99.6% 試験濃度：設定濃度 0.063、0.13、0.25、0.50、1.0 mg/L 実測濃度 0.0096、0.033、0.081、0.21、0.41 mg/L（算術平均値） 助剤：DMF 0.1 mL/L 21dNOEC（実測値に基づく）=0.081 mg/L		
生態影響 判定根拠	藻類生長阻害試験において 72hNOEC=0.040 mg/L、ミジンコ繁殖阻害試験において 21dNOEC=0.081 mg/L であることから、第三種監視化学物質相当。		
備考	試験用水溶解度：藻類培地：0.69 mg/L、脱塩素水道水：0.48 mg/L ※ ¹ 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績）		

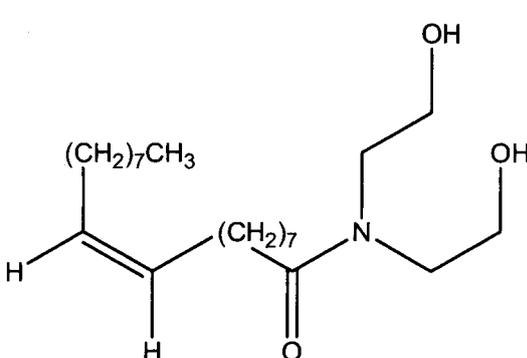
既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-66 2-68	CAS No.	111-85-3
判定案	生態影響 第三種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：1-クロロオクタン 		
用途	2-68 として中間物、ゴム添加剤、潤滑・研削油、その他 ^{※1}		
製造及び 輸入数量	2-68 として 10,000~100,000 t 未満 ^{※1}		
外観	無色透明液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	—		
藻類生長 阻害試験	生物種： <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> 試験法：OECD-TG201 (1984) 培養方式：振とう培養 純度：≥95.0% 試験濃度：設定濃度 3.6、8.2、19、44、100 mg/L 実測濃度 0.074、0.095、0.16、0.27、1.5 mg/L (幾何平均値) 助剤：HCO-50 100 mg/L 72hEC50 (実測値に基づく) >1.5 mg/L 72hNOEC (実測値に基づく) =0.27 mg/L ①実測濃度の幾何平均値を用いて、速度法に基づく毒性値を再計算している。		
ミジンコ 繁殖阻害 試験	生物種：オオミジンコ <i>Daphnia magna</i> 試験法：OECD-TG211 (1997) 試験方式：半止水式、週に3回換水 純度：≥95.0% 試験濃度：設定濃度 0.070、0.12、0.21、0.38、0.69、1.2 mg/L 実測濃度 —、—、—、0.073、0.17、0.30 mg/L (時間加重平均値) 助剤：HCO-50 100 mg/L 21dNOEC (実測値に基づく) =0.073 mg/L		
魚類初期 生活段階 毒性試験	生物種：ヒメダカ <i>Oryzias latipes</i> 試験法：OECD-TG210 (1992) 試験方式：流水式 純度：99.9% 試験濃度：設定濃度 0.015、0.038、0.095、0.24、0.60 mg/L 実測濃度 0.0085、0.021、0.057、0.16、0.40 mg/L (算術平均値) 助剤：HCO-60 1.2 mg/L、DMF 約0.1 mL/L 40dNOEC (孵化後の生存率) (実測値に基づく) =0.057 mg/L		
生態影響 判定根拠	藻類生長阻害試験において 72hNOEC=0.27 mg/L であるが、ミジンコ繁殖阻害試験において 21dNOEC=0.073 mg/L、魚類初期生活段階毒性試験において 40dNOEC=0.057 mg/L であることから、第三種監視化学物質相当。		
備考	対水溶解度：4.89 mg/L (25℃) (EPI Suite v.4.0) ※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成19年実績)		

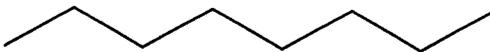
既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-176 2-185	CAS No.	124-28-7
判定案	生態影響 第三種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：N，N-ジメチル-n-オクタデシルアミン $\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\ \diagdown \\ \text{N} \\ \diagup \\ \text{H}_3\text{C} \end{array} \text{---} (\text{CH}_2)_{17} \text{---} \text{CH}_3$		
用途	2-176 として中間物、工業用洗浄剤、家庭等洗浄剤、工業用殺菌等、ゴム添加剤、水処理剤、その他 ^{※1}		
製造及び 輸入数量	2-176 として 1,000～10,000 t 未満 ^{※1}		
外観	無色透明液体		
分解性	良分解性		
蓄積性	-		
藻類生長 阻害試験	生物種： <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> 試験法： OECD-TG201 (1984) 培養方式： 振とう培養 純度： 93.3% 試験濃度： 設定濃度 0.0015、0.0027、0.0049、0.0089、0.016 mg/L 実測濃度 0.00060、0.00070、0.0010、0.0013、0.0018 mg/L (幾何平均値) 助剤： HCO-40 0.16 mg/L 72hEC50 (実測値に基づく) = 0.0018 mg/L 72hNOEC (実測値に基づく) = 0.0010 mg/L ①実測濃度の幾何平均値を用いて、速度法に基づく毒性値を再計算している。		
ミジンコ 繁殖阻害 試験	生物種： オオミジンコ <i>Daphnia magna</i> 試験法： OECD-TG211 (1998) 試験方式： 半止水式、24 時間毎に換水 純度： 93.3% 試験濃度： 設定濃度 0.0031、0.0063、0.013、0.025、0.050 mg/L 実測濃度 -、-、-、0.011、- mg/L (時間加重平均値) 助剤： HCO-40 0.50 mg/L 21dNOEC (設定値に基づく) = 0.0063 mg/L		
生態影響 判定根拠	藻類生長阻害試験において 72hNOEC=0.0010 mg/L、ミジンコ繁殖阻害試験において 21dNOEC=0.0063 mg/L であることから、第三種監視化学物質相当。		
備考	対水溶解度： 0.44 mg/L (化審法の既存化学物質安全性点検データ集) ※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成19年実績)		

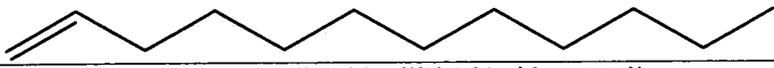
既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-814 2-827 2-2503	CAS No.	93-83-4
判定案	生態影響 第三種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：N, N-ビス(2-ヒドロキシエチル)-オレアミド 		
用途	2-814、2-827、2-2503として工業用洗浄剤、家庭等洗浄剤、繊維剤、樹脂添加剤、潤滑・研削油、電気電子材料、その他 ^{*1}		
製造及び 輸入数量	2-814、2-827、2-2503として1,000～10,000 t未満 ^{*1}		
外観	無色透明液体		
分解性	-		
蓄積性	-		
藻類生長 阻害試験	生物種： <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> 試験法：OECD-TG201 (1984) 培養方式：振とう培養 純度：75.1% 試験濃度：設定濃度 1.0、2.1、4.4、9.2、19、41、85 mg/L 実測濃度 0.55、1.1、2.4、5.1、12、22、55 mg/L (幾何平均値) 助剤：不明 72hEC50 (実測値に基づく) >55 mg/L 72hNOEC (実測値に基づく) =12 mg/L ①実測濃度の幾何平均値を用いて、速度法に基づく毒性値を再計算している。		
ミジンコ 繁殖阻害 試験	生物種：オオミジンコ <i>Daphnia magna</i> 試験法：OECD-TG211 (1998) 試験方式：半止水式、週に3回換水 純度：75.1% 試験濃度：設定濃度 0.021、0.038、0.069、0.12、0.22、0.40 mg/L 実測濃度 -、-、0.010、0.026、0.057、0.13 mg/L (時間加重平均値) 助剤：HCO-50 1.2 mg/L 21dNOEC (実測値に基づく) =0.057 mg/L		
生態影響 判定根拠	藻類生長阻害試験において72hNOEC=12 mg/Lであるが、ミジンコ繁殖阻害試験において21dNOEC=0.057 mg/Lであることから、第三種監視化学物質相当。		
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成19年実績)		

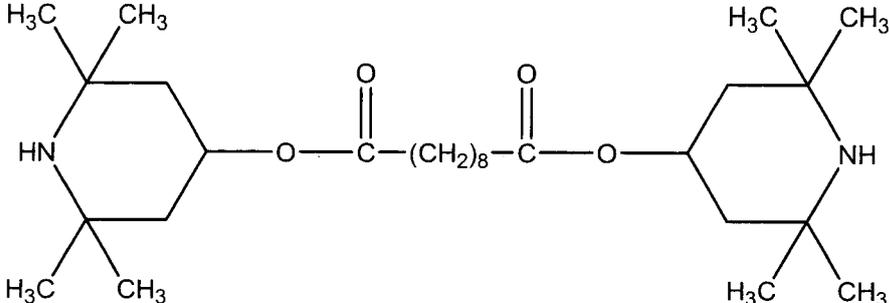
既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-8	CAS No.	111-65-9
判定案	生態影響 第三種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：オクタン 		
用途	2-8 として溶剤、燃料等 ^{※1}		
製造及び 輸入数量	2-8 として 1,000,000～10,000,000 t 未満 ^{※1}		
外観	無色透明液体		
分解性	-		
蓄積性	-		
藻類生長 阻害試験	生物種：Pseudokirchneriella subcapitata 試験法：OECD-TG201 (1984) 培養方式：振とう培養（密閉系） 純度：99.2% 試験濃度：設定濃度 20 mg/L (24 時間振とう後にばく露)、5.0、10、20 mg/L (試験液調製直後にばく露) 実測濃度 0.089、0.28、0.57、1.1 mg/L (幾何平均値) 助剤：HCO-40 100 mg/L 溶解限度で影響が認められなかった。 ①実測濃度の幾何平均値を用いて、速度法に基づく毒性値を再計算している。		
ミジンコ 繁殖阻害 試験	生物種：オオミジンコ <i>Daphnia magna</i> 試験法：OECD-TG211 (1997) 試験方式：半止水式、24 時間毎に換水 純度：99.2% 試験濃度：設定濃度 0.024、0.043、0.077、0.14、0.25 mg/L 実測濃度 0.013、0.023、0.045、0.084、0.16 mg/L (時間加重平均値) 助剤：HCO-40 濃度不明 21dNOEC (実測値に基づく) = 0.045 mg/L		
魚類初期 生活段階 毒性試験	生物種：ヒメダカ <i>Oryzias latipes</i> 試験法：OECD-TG210 (1992) 試験方式：流水式 純度：98.1% 試験濃度：設定濃度 0.010、0.025、0.063、0.16、0.40 mg/L 実測濃度 0.0057、0.013、0.028、0.069、0.19 mg/L (算術平均値) 助剤：HCO-60 0.8 mg/L、DMF 約 0.1 mL/L 41dNOEC (体重・体長) (実測値に基づく) = 0.028 mg/L		
生態影響 判定根拠	藻類生長阻害試験において溶解限度で影響が認められないが、ミジンコ繁殖阻害試験において 21dNOEC=0.045 mg/L、魚類初期生活段階毒性試験において 41dNOEC=0.028 mg/L であることから、第三種監視化学物質相当。		
備考	対水溶解度：0.66mg/L (20℃) (Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals) ※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成19年実績)		

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	2-27	CAS No.	112-41-4
判定案	生態影響 第三種監視化学物質相当		
名称 構造式等	名称：1-ドデセン 		
用途	2-27として中間物、溶剤、塗料用、繊維剤、樹脂添加剤、その他		
製造及び 輸入数量	2-27として10,000～100,000 t 未満 ^{※1}		
外観	無色透明液体		
分解性	-		
蓄積性	-		
藻類生長 阻害試験	生物種： <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> 試験法： OECD-TG201 (1984) 培養方式： 振とう培養 純度： 95% 試験濃度： 設定濃度 0.45、0.95、2.0、4.3、9.0、19、40 mg/L 実測濃度 0.016、0.020、0.030、0.041、0.059、0.086、0.097 mg/L (幾何平均値) 助剤： HCO-50 100 mg/L 72hEC50 (実測値に基づく) >0.097 mg/L 72hNOEC (実測値に基づく) =0.059 mg/L ①実測濃度の幾何平均値を用いて、速度法に基づく毒性値を再計算している。		
ミジンコ 繁殖阻害 試験	生物種： オオミジンコ <i>Daphnia magna</i> 試験法： OECD-TG211 (1998) 試験方式： 半止水式、週に3回換水 純度： 95% 試験濃度： 設定濃度 0.019、0.033、0.060、0.11、0.19、0.35 mg/L 実測濃度 0.0051、0.012、0.012、0.028、0.041、0.11mg/L (時間加重平均値) 助剤： HCO-50 100 mg/L 21dNOEC (実測値に基づく) =0.041 mg/L		
生態影響 判定根拠	藻類生長阻害試験において 72hNOEC=0.059 mg/L、ミジンコ繁殖阻害試験において 21dNOEC=0.041 mg/Lであることから、第三種監視化学物質相当。		
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成19年実績)		

既存化学物質審査シート

官報公示 整理番号	5-3732	CAS No.	52829-07-9
判定案	生態影響 第三種監視化学物質相当		
名称 構造式等	<p>名 称：デカン二酸ビス（2，2，6，6-テトラメチル-4-ピペリジニル）</p> 		
用途	5-3732 として塗料用、接着剤用、樹脂添加剤、電気電子材料 ^{※1}		
製造及び 輸入数量	5-3732 として 10,000～100,000 t 未満 ^{※1}		
外観	白色結晶性粉末		
分解性	-		
蓄積性	-		
藻類生長 阻害試験	<p>生物種：<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> 試験法：OECD-TG201（1984） 培養方式：振とう培養 純度：99.2% 試験濃度：設定濃度 0.020、0.043、0.093、0.20、0.43、0.93、2.0 mg/L 実測濃度 0.011、0.013、0.050、0.13、0.35、0.72、1.8 mg/L（幾何平均値） 助剤：THF 及び HCO-40 40 mg/L 72hEC50（実測値に基づく）=1.0 mg/L 72hNOEC（実測値に基づく）=0.050 mg/L</p> <p>①実測濃度の幾何平均値を用いて、速度法に基づく毒性値を再計算している。</p>		
ミジンコ 繁殖阻害 試験	<p>生物種：オオミジンコ <i>Daphnia magna</i> 試験法：OECD-TG211（1998） 試験方式：半止水式、24 時間毎に換水 純度：99.2% 試験濃度：設定濃度 0.10、0.30、0.90、2.8、8.5 mg/L 実測濃度 0.080、0.23、0.61、2.1、6.7 mg/L（時間加重平均値） 助剤：THF 及び HCO-40 68 mg/L 21dNOEC（実測値に基づく）=0.23 mg/L</p>		
生態影響 判定根拠	ミジンコ繁殖阻害試験において 21dNOEC=0.23 mg/L であるが、藻類生長阻害試験において 72hNOEC=0.050 mg/L であることから、第三種監視化学物質相当。		
備考	※1 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成19年実績）		

化学物質排出把握管理促進法の第一種及び第二種指定化学物質の一部を
化審法第二種及び第三種監視化学物質に指定することについて

平成 21 年 12 月 18 日

厚生労働省医薬食品局審査管理課化学物質安全対策室
経済産業省製造産業局化学物質管理課化学物質安全室
環境省総合環境政策局環境保健部企画課化学物質審査室

1. 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律（化管法）の第一種及び第二種指定化学物質のうち、当該化学物質について収集された科学的知見^(※)並びに分解性及び蓄積性に関する既存点検結果から判断して化審法における第二種及び第三種監視化学物質の要件に該当するものについては、順次第二種及び第三種監視化学物質として指定しているところである。
2. 昨年 12 月に開催された 3 省審議会においては、昨年 11 月に新たに化管法の第一種及び第二種指定化学物質に指定された物質について、次の考え方に従って第二種及び第三種監視化学物質として指定することとした。

【化審法第二種及び第三種監視化学物質の指定に関する考え方】

(1) 第二種監視化学物質

以下の化学物質を除外した上で、既存点検結果等から難分解性であり高蓄積性でないと判断されている化学物質を指定する。

- ①化審法の審査対象外の化学物質（専ら医薬品及び農薬として使用されているもの等）
- ②既に化審法の第一種及び第二種特定化学物質に指定されている化学物質
- ③人健康影響以外の観点で対象となった化学物質（生態毒性及びオゾン層破壊性）

(2) 第三種監視化学物質

1) 以下の化学物質を除外した上で、既存点検結果等から難分解性であると判断されている化学物質を選定する。

- ①化審法の審査対象外の化学物質（専ら医薬品及び農薬として使用されているもの等）
- ②既に化審法の第一種及び第二種特定化学物質に指定されている化学物質
- ③生態毒性以外の観点で対象となった化学物質（人健康影響及びオゾン層破壊性）

3) 1) で選定した物質のうち、「監視化学物質への該当性の判定等に係る試験方法及び判定基準」に基づき、第三種監視化学物質に該当することが明らかなものについて指定する。

3. 今回、既に化管法対象物質に指定されていた物質のうち、分解性・蓄積性に関する既存点検の結果等が得られているものについて、上記の指定に関する考え方に従って、新たに第二種及び第三種監視化学物質に指定することとしたい。（指定予定物質は別

添 1 - 1 及び 2 - 1、根拠データは別添 1 - 2、2 - 2 を参照)

(参考) 化学物質排出把握管理促進法における有害性の考え方

化学物質排出把握管理促進法では、人健康影響に係る毒性項目、生態毒性及びオゾン層破壊性を有害性の要件としている。人健康影響及び生態毒性に係る具体的な選定基準は以下のとおり。

人健康影響に係る選定基準	発がん性	人に対して発がん性がある～疑いが強い (IARC で 2B 以上)
	変異原性* ¹	① in vivo 陽性、② Ames 比活性値 1000 以上かつ染色体陽性、③染色体 D20 値が 0.01 以下かつ Ames 陽性、④ Ames 比活性値 100 以上かつ染色体 D20 値 0.1 以下、⑤その他①～④と同程度以上の変異原性を有するもの
	経口慢性毒性	NO (A) EL 0.01 ～ 1mg/kg/day 以下 (化管法分類クラス 1 ～ 3)
	吸入慢性毒性	経口毒性と同程度の基準となる吸入 NOAEL 値
	作業環境	吸入慢性毒性と同程度となる TWA (時間加重平均値) 値
	生殖発生毒性	人の生殖能力を害する (発生毒性を引き起こす) ～懸念を引き起こす物質
生態毒性に係る選定基準* ²	感受性	気道感受性がある物質あるいは根拠となるデータのある物質
		クラス 1 : NOEC 0.1mg/l 以下又は L (E) C50 1mg/l 以下又は EU R50* ³ クラス 2 : NOEC 1mg/l 以下又は L (E) C5 10mg/l 以下又は EU R61* ³

*¹ Ames 試験の比活性値の単位は rev/mg、染色体異常試験の D20 値の単位は mg/mL。

*² OECD テストガイドラインを用いて行った藻類、ミジンコ及び魚類に係る試験結果等を用いる。

*³ EU における分類表示については、根拠としうる定量的データがある場合に利用する。

化管法第一種・第二種指定化学物質から化審法第二種監視化学物質への指定予定物質

No.	化管法 種別	化管法 政令 番号	物質名	分 解 性	濃 縮 性	化審法 規制 区分	化管法クラス分類						CAS No.	化審法 官報公示 整理番号
							発が ん性	生殖 毒性	変異 原性	経口 慢性	吸入 慢性	作業 環境		
1	一種	37	4,4'-イソプロピリデンジフェノール	難	低	三監		3					80-05-7	4-123
2	一種	436	アルファ-メチルスチレン	難	低	三監			1				98-83-9	3-5 3-8
3	一種	448	メチレンビス(4,1-フェニレン)=ジイソシア	難	低					1	1	1	101-68-8	4-118
4	二種	46	1,4-ジブロモブタン	難	低				1				110-52-1	2-59
5	二種	40	ジナトリウム=8-[3,3'-ジメチル-4'-[4- [(パラトリル)スルホニルオキシ]フェニ ルアゾ]-1,1'-ビフェニル-4-イルアゾ]-7- ヒドロキシ-1,3-ナフタレンジスルホナート	難	低		2						6459-94- 5	5-1518

No.	化管法 種別	化管法 政令番号	化学物質名	分解 性	濃縮 性	CAS No.	化審法 官報公示 整理番号	化審法 規制 区分	人健康影響に関する情報									
									種別	クラス	試験法	菌種・細胞 種・動物種	投与期間	結果	評価指標	毒性値	備考	出典
1	一種	37	4,4'-イソプロピリデンジフェノール	難	低	80-05-7	4-123	三監	生殖毒性	3	経口(混餌)				NOAEL	50mg/kg/day	産児数の減少、精囊、 精巣上体重量の減少 (EU生殖発生分類及 びリスク警句:カテゴリー 3(R62))	CERI有害性 評価書(2005)
2	一種	436	アルファ-メチルスチレン	難	低	98-83-9	3-5 3-8	三監	変異原性	1	体細胞小核 試験	マウス		陽性				NTP(2006)
3	一種	448	メチレンビス(4,1'-フェニレン)=ジイソシ アネート	難	低	101-68-8	4-118		吸入慢性毒性	1		ラット	24ヶ月		LOAEL	0.23mg/m ³	肺と呼吸器の障害	CICAD(2000)
									作業環境	1					TWA	0.05mg/m ³	気道感作	日本産業衛 生学会
										1					TWA	0.051mg/m ³	気道感作	ACGIH(2007)
感作性	1															第1群(日本産業衛生 学会) R42(EUリスク警句)		
4	二種	46	1,4-ジプロモブタン	難	低	110-52-1	2-59		変異原性	1	復帰突然変 異試験				比活性値	1640rev./mg		安衛法変異 原性試験結 果(2005)
										1	染色体異常 試験				D20値	0.075mg/mL		安衛法変異 原性試験結 果(2005)
5	二種	40	ジナトリウム=8-[3,3'-ジメチル-4'-[4- [(パラートリル)スルホニルオキシ]フェ ニルアゾ]-1,1'-ピフェニル-4-イルア ゾ]-7-ヒドロキシ-1,3-ナフタレンジスル ホナート	難	低	6459-94-5	5-1518		がん原性	2							2B(IARC) 2B(日本産業衛生学 会)	

化管法第一種・第二種指定化学物質から化審法第三種監視化学物質への指定予定物質

No.	化管法 種別	化管法 政令 番号	物質名	分 解 性	濃 縮 性	化審法 規制 区分	化管法クラス分	CAS No.	化審法 官報公示 整理番号
							生態毒性		
1	一種	10	アクロレイン	難	低	二監	1	107-02-8	2-521
2	一種	23	パラ-アミノフェノール	難	低		1	123-30-8	3-675
3	一種	45	エタンチオール	難	低		1	75-08-1	2-460
4	一種	61	N,N'-エチレンビス(ジチオカルバミン酸) マンガン	難			1	12427-38-2	2-1841
5	一種	74	パラ-オクチルフェノール	難	低		1	1806-26-4	3-503
6	一種	97	1-クロロ-2-(クロロメチル)ベンゼン	難	低		1	611-19-8	3-78 3-91
7	一種	127	クロロホルム	難	低	二監	2	67-66-3	2-37
8	一種	152	1,3-ジカルバモイルチオ-2-(N,N-ジメチルアミノ)-プロパン	難	低		1	15263-53-3	2-1812
9	一種	167	1,4-ジクロロ-2-ニトロベンゼン	難	低	二監	1	89-61-2	3-455
10	一種	169	3-(3,4-ジクロロフェニル)-1,1-ジメチル尿	難	低	二監	1	330-54-1	3-2194
11	一種	174	3-(3,4-ジクロロフェニル)-1-メトキシ-1-メチル尿素	難	低	二監	1	330-55-2	3-2193
12	一種	179	1,3-ジクロロプロペン	難	低	二監	1	542-75-6	2-125
13	一種	186	ジクロロメタン	難	低	二監	2	75-09-2	2-36
14	一種	187	2,3-ジシアノ-1,4-ジチアアントラキノン	難	低		1	3347-22-6	5-850
15	一種	189	N,N-ジシクロヘキシル-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミド	難	高	一監 二監	1	4979-32-2	5-256
16	一種	197	ジチオリン酸O,O-ジメチル-S-1,2-ビス(エトキシカルボニル)エチル	難	低		1	121-75-5	2-1963
17	一種	210	2,2-ジプロモ-2-シアノアセトアミド	難	低		1	10222-01-2	2-2795
18	一種	226	1,1-ジメチルヒドラジン	難	低	二監	1	57-14-7	2-200
19	一種	230	N-(1,3-ジメチルブチル)-N'-フェニル-パラフェニレンジアミン	難	低		1	793-24-8	3-136 3-368
20	一種	233	2-[(ジメチルホスフィノチオイル)チオ]-	難	低	二監	1	2597-03-7	3-2615
21	一種	244	2-チオキソ-3,5-ジメチルテトラヒドロ-2H-	難	低		1	533-74-4	5-1085
22	一種	245	チオ尿素	難	低	二監	2	62-56-6	2-1733
23	一種	251	チオリン酸O,O-ジメチル-O-(3-メチル-4-ニトロフェニル)	難	低	二監	1	122-14-5	3-2616
24	一種	260	テトラクロロイソフタロニトリル	難	低	二監	1	1897-45-6	3-1805
25	一種	268	テトラメチルチウラムジスルフィド	難	低	二監	1	137-26-8	2-1820
26	一種	285	トリクロロニトロメタン	難	低		1	76-06-2	2-199
27	一種	325	ビス(8-キノリノラト)銅	難			1	10380-28-6	5-805
28	一種	328	ビス(N,N-ジメチルジチオカルバミン酸)亜鉛	難	低	二監	1	137-30-4	2-1833 9-607
29	一種	329	ビス(N,N-ジメチルジチオカルバミン酸)N,N'-エチレンビス(チオカルバモイルチオ	難			1	64440-88-6	2-1848
30	一種	372	N-(ターシャリ-ブチル)-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミド	難	低		1	95-31-8	5-3417
31	一種	386	プロモメタン	難	低	二監	1	74-83-9	2-39
32	一種	425	N-メチルカルバミン酸2-イソプロピルフェニル	難	低	二監	1	2631-40-5	3-2211 3-2212
33	一種	433	N-メチルジチオカルバミン酸	難	低		1	144-54-7	2-1796
34	一種	447	メチレンビス(4,1-シクロヘキシレン)=ジイ	難			2	5124-30-1	4-119
35	二種	4	3-アミノ-1H-1,2,4-トリアゾール	難	低	二監	2	61-82-5	5-602
36	二種	91	6-メチル-1,3-ジチオロ[4,5-b]キノキサリ	難			1	2439-01-2	5-5507
37	二種	93	メチルヒドラジン	難	低	二監	2	60-34-4	2-2385

No.	化管法種別	化管法政令番号	化学物質名	分解性	濃縮性	CAS No.	化審法官報公示整理番号	化審法規制区分	生態リスク	EU/生態毒性	化管法追加物質の生態毒性						参考		備考		
											生物種	生物名(和名)	暴露時間	単位	エンドポイント	毒性値	単位	出典		溶解度(mg/L)	Log Pow
1	一種	10	アクロレイン	難	低	107-02-8	2-521	二監	1	R50	魚類	ファットヘッドミノー	96	時間	LC50	14	μg/L	環境省リスク評価(2003)	250000	-0.01	
2	一種	23	パラ-アミノフェノール	難	低	123-30-8	3-675		1	R50-53	藻類	セテナストラム	72	時間	ErC50	0.1	mg/L	環境省生態影響試験	6500	0.04	
3	一種	45	エタンチオール	難	低	75-08-1	2-460		1	R50-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	0.077	mg/L	環境省生態影響試験	6760	1.27	
4	一種	61	N,N'-エチレンビス(ジチオカルバミン酸)マンガン	難		12427-38-2	2-1841		1	NC	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	0.189	mg/L	GHS3省分類の情報源			
5	一種	74	パラ-オクチルフェノール	難	低	1806-26-4	3-503		1		魚類	ヒメダカ	96	時間	LC50L	0.0878	mg/L	CERIハザードデータ集(2002)	1.8	5.5	
6	一種	97	1-クロロ-2-(クロロメチル)ベンゼン	難	低	611-19-8	3-78 3-91		1		甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	0.38	mg/L	SIDS(2004)			
7	一種	127	クロロホルム	難	低	67-66-3	2-37	二監	2	NC	魚類	ニジマス	96	時間	LC50	1.24-2.03	mg/L	CICAD	5	1.97	
8	一種	152	1,3-ジカルバモイルチオ-2-(N,N-ジメチルアミノ)-プロパン	難	低	15263-53-3	2-1812		1	R50-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	LC50	10	μg/L	AQUIRE(2003)			
9	一種	167	1,4-ジクロロ-2-ニトロベンゼン	難	低	89-61-2	3-455	二監	1		魚類	コイ	96	時間	LC50	0.118	mg/L	CERI有害性評価書	14	3.09	
10	一種	169	3-(3,4-ジクロロフェニル)-1,1-ジメチル尿素	難	低	330-54-1	3-2194	二監	1	R50-53	藻類	緑藻	72	時間	EbC50	0.013	mg/L	GHS3省分類の情報源	42	2.68	
11	一種	174	3-(3,4-ジクロロフェニル)-1-メトキシ-1-メチル尿素	難	低	330-55-2	3-2193	二監	1	R50-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	0.12	mg/L	GHS3省分類の情報源	75	3.2	
12	一種	179	1,3-ジクロロプロペン	難	低	542-75-6	2-125	二監	1	R50-53	魚類	シーブスヘッドミノー	96	時間	LC50	0.068	mg/L	CERIハザードデータ集(1997)	0.15%	1.36	
13	一種	186	ジクロロメタン	難	低	75-09-2	2-36	二監	2	NC	魚類	ファットヘッドミノー	96	時間	LC50	5.2	mg/L	EHC(1989)	13000	1.25	
14	一種	187	2,3-ジシアノ-1,4-ジチアアントラキノン	難	低	3347-22-6	5-850		1	R50-53	魚類	コイ	96	時間	LC50	59.6	μg/L	GHS3省分類の情報源	0.5	2.84	
15	一種	189	N,N-ジシクロヘキシル-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミド	難	高	4979-32-2	5-256	一監 二監	1		藻類	セテナストラム	72	時間	NOEC	0.0118	mg/L	SIDS(2004)	0.0564	4.8	
16	一種	197	ジチオリン酸O,O-ジメチル-S-1,2-ビス(エトキシカルボニル)エチル	難	低	121-75-5	2-1963		1	R50-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	0.72	μg/L	GHS3省分類の情報源	145	2.89	
17	一種	210	2,2-ジプロモ-2-シアノアセトアミド	難	低	10222-01-2	2-2795		1		魚類	ファットヘッドミノー	96	時間	LC50	0.55	mg/L	AQUIRE(2007)	1970	1.01	
18	一種	226	1,1-ジメチルヒドラジン	難	低	57-14-7	2-200	二監	1	R51-53	魚類	ファットヘッドミノー	96	時間	LC50	0.00785	μg/L	AQUIRE(2003)	1000000	-1.9	
19	一種	230	N-(1,3-ジメチルブチル)-N'-フェニル-パラ-フェニレンジアミン	難	低	793-24-8	3-136 3-368		1		甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	0.23	mg/L	SIDS(2004)	1.1	5.4	
20	一種	233	2-[(ジメチルシホスフィノチオイル)チオ]-2-フェニル酢酸エチル	難	低	2597-03-7	3-2615	二監	1	R50-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	0.00025	mg/L	GHS3省分類の情報源	11	3.69	
21	一種	244	2-チオキソ-3,5-ジメチルテトラヒドロ-2H-1,3,5-チアジアジン	難	低	533-74-4	5-1085		1	R50-53	魚類	ニジマス	96	時間	LC50	0.16	ppm	AQUIRE(2003)	3000	1.4	
22	一種	245	チオ尿素	難	低	62-56-6	2-1733	二監	2	R51-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	LC50	9	mg/L	CERI有害性評価書	120000	-1.02	アミン類
23	一種	251	チオリン酸O,O-ジメチル-O-(3-メチル-4-ニトロフェニル)	難	低	122-14-5	3-2616	二監	1	R50-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	LC50	0.0086	mg/L	EHC(1992)	30	3.27	
24	一種	260	テトラクロロイソフタロニトリル	難	低	1897-45-6	3-1805	二監	1	R50-53	魚類	ニジマス	96	時間	LC50	10.5	μg/L	環境省リスク評価(2003)	0.6	4.38	
25	一種	268	テトラメチルチウラムジスルフィド	難	低	137-26-8	2-1820	二監	1	R50-53	魚類	ファットヘッドミノー	96	時間	LC50	13.2	μg/L	環境省リスク評価(2003)	16.5	1.82	
26	一種	285	トリクロロニトロメタン	難	低	76-06-2	2-199		1	NC	魚類	ニジマス	96	時間	LC50	0.0165	mg/L	CERIハザードデータ集(2001)	1621	2.09	
27	一種	325	ビス(8-キノリノラト)銅	難		10380-28-6	5-805		1		藻類	緑藻	72	時間	ErC50	0.0762	mg/L	GHS3省分類の情報源	不溶		
28	一種	328	ビス(N,N-ジメチルジチオカルバミン酸)亜鉛	難	低	137-30-4	2-1833 9-607	二監	1	R50-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	LC50	0.14	mg/L	EHC(1988)	65	1.09	

No.	化管法 種別	化管法 政令番 号	化学物質名	分 解 性	濃 縮 性	CAS No.	化審法 官報公示 整理番号	化審法 規制 区分	生 態 危 入	EU/生態 毒性	化管法追加物質の生態毒性						参考		備 考		
											生物種	生物名(和名)	暴 露 時 間	単 位	エン ド ポ イ ン ト	毒 性 値	単 位	出 典		溶 解 度 (mg/L)	Log Pow
29	一種	329	ビス(N,N-ジメチルジチオカルバミン酸) N,N'-エチレンビス(チオカルバモイルチオ亜 N-(ターシャリ-ブチル)-2-ベンゾチアゾール スルフェンアミド	難		64440-88- 6	2-1848		1		魚類	コイ	96	時間	LC50	0.91	mg/L	GHS3省分 類の情報源	不溶		
30	一種	372		難	低	95-31-8	5-3417		1		藻類	セテナストラム	72	時間	ErC50	0.071	mg/L	SIDS (2004)	0.3	4.38	
31	一種	386	プロモetan	難	低	74-83-9	2-39	二監	1	R50	魚類	グッピー	96	時間	LC50	0.3	mg/L	CERIハザード データ集 (2002)	17500	1.19	
32	一種	425	N-メチルカルバミン酸2-イソプロピルフェニ ル	難	低	2631-40-5	3-2211 3-2212	二監	1	R50-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	24	μ g/L	GHS3省分 類の情報源	400	2.31	
33	一種	433	N-メチルジチオカルバミン酸	難	低	144-54-7	2-1796		1		藻類	緑藻	72	時間	Ebc50	0.062	mg/L	GHS3省分 類の情報源	722000	<1	
34	一種	447	メチレンビス(4,1-シクロヘキシレン)=ジイソ シアネート	難		5124-30-1	4-119		2	NC	魚類	ゼブラフィッシュ	96	時間	LC50	1.2	mg/L	CERIハザード データ集 (2002)	0.12	6.11	
35	二種	4	3-アミノ-1H-1,2,4-トリアゾール	難	低	61-82-5	5-602	二監	2	R51-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	1.54	mg/L	EHC (1994)	280000	-0.86	アミン類
36	二種	91	6-メチル-1,3-ジチオロ[4,5-b]キノキサリン -2-オン	難		2439-01-2	5-5507		1	R50-53	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	0.015	mg/L	GHS3省分 類の情報源	1	3.78	
37	二種	93	メチルヒドラジン	難	低	60-34-4	2-2385	二監	2		魚類	グッピー	96	時間	LC50	2580	μ g/L	AQUIRE (2003)	1000000	-1.05	

生物濃縮性の評価におけるカテゴリーアプローチの利用について

平成 21 年 12 月 18 日

経済産業省製造産業局

化学物質安全室

1. 背景

化学物質の特性を化学構造から評価する方法の一つであるカテゴリーアプローチは、物質をグループとして評価し、グループの中に試験が行われていない物質がある場合に、同じグループの試験が行われた物質のデータから特性を予測することに利用される。OECDのHPVマニュアルによるとカテゴリーとは構造類似性に基づき物理化学的及び毒性学的特性が規則的なパターンを示す又は類似する物質とされており、ある物質群をカテゴリーとして成立させるにはメカニズムに基づいた根拠があることが前提となっている点で、構造活性相関ソフトウェアによる予測や類推とは異なる。

これまで、(独)製品評価技術基盤機構(以下「NITE」という)の構造活性相関委員会において、カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測について検討を行ってきたところ、「単純受動拡散カテゴリー」に関して一定の成果が得られた(別添1参照)。

※NITEのホームページに「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」を公開中。(http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/category_approach.html)

2. 今後の取り扱い

今後、合同審議会において、「単純受動拡散カテゴリー」に該当する化学物質について、カテゴリーアプローチによる予測結果を新規化学物質及び既存化学物質の審査の参考資料として、構造活性相関ソフトウェアによる予測結果とあわせて活用することとする(別添2参照)。また、相談案件における類推の可否の判断の参考資料としてもカテゴリーアプローチによる予測結果を活用するとともに、その結果を参考データとして審査シートに記載することとする。

なお、NITEの構造活性相関委員会では、「単純受動拡散カテゴリー」について知見の集積を図るとともに、本カテゴリー以外のカテゴリーについても検討していく予定であることから、今後の予測手法の検討状況や本審議会での参考資料としての活用実績を踏まえて、将来的に化審法における判定への利用可能性について検討を行うこととする。

(参考1) N I T Eにおけるこれまでの検討経緯 (要点)

- (1) 化学物質の生物濃縮性は生体膜透過のメカニズム (①受動拡散、②能動輸送、③傍細胞経由、④膜動輸送) と生体内での反応性 (代謝や蛋白質結合性等) に依存する。
- (2) このうち、受動拡散による生体膜透過が濃縮の支配的要因である物質は、 $\log BCF$ と $\log Pow$ の間に相関関係があることが知られている。この中で特に、ファンデルワールス力が主要な分子間相互作用として働く (水素結合性や極性の官能基を持たない) 物質群は、拡散速度に影響を及ぼす因子が類似していると見なせるため $\log BCF$ と $\log Pow$ の間に強い相関関係がある予想される。そこで、このような物質群を「単純受動拡散カテゴリー」と定義し、これに該当する物質の化学構造上の特徴を調べた。
- (3) 化審法の濃縮度試験データを解析した結果、単純受動拡散カテゴリーには、芳香族炭化水素及びそのハロゲン化物、脂肪族炭化水素及びそのハロゲン化物が該当することを確認した (但し、水中で容易に反応する物質例えば塩化ベンジルなどは含まない)。

※生物濃縮性の試験データがある化審法既存化学物質で単純受動拡散に該当する物質の一覧は報告書に記載。

- (4) 単純受動拡散カテゴリーに該当する物質について $\log Pow$ - $\log BCF$ の相関式を作成したところ、良好な相関関係を得ることができた (下図参照)。この相関式は、適用範囲は $\log Pow$ が 6 未満で D_{max} ※が 11Å 未満の物質に適用することができる。

※分子を球に入れたとき最小となる直径。

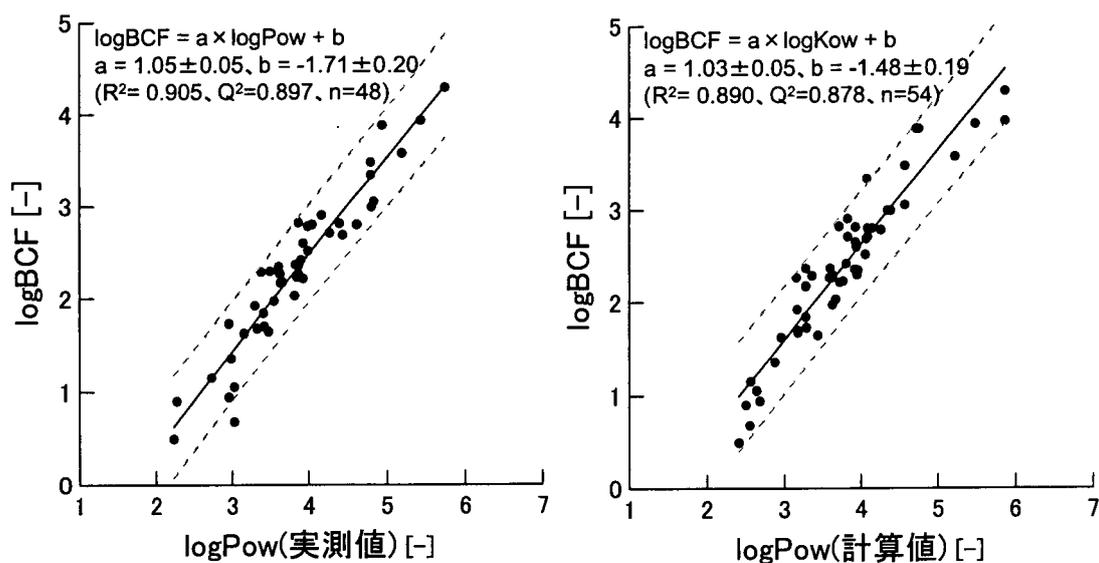
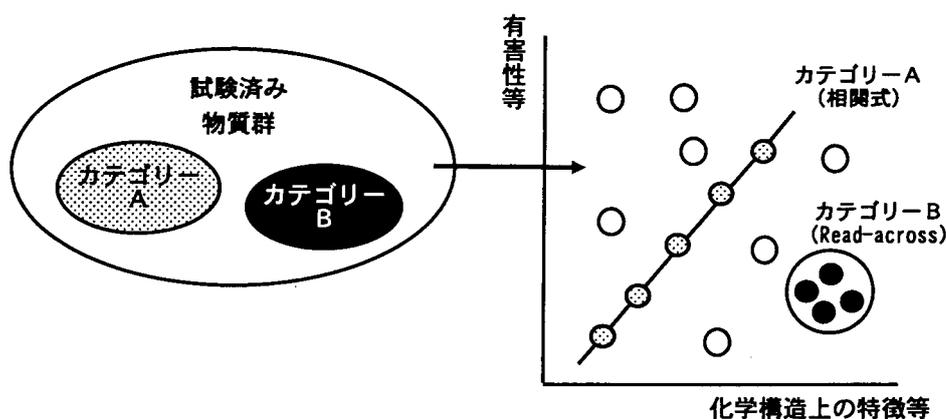


図. 単純受動拡散カテゴリーに該当する物質の $\log Pow$ - $\log BCF$ 相関式

(5) また、単純受動拡散カテゴリーに該当する物質について、Read-acrossにより濃縮性を予測する方法についてケーススタディを行い、類似物質が多くある場合など、場合によっては相関式より精度良く予測できることを確認した。

(参考2) カテゴリーアプローチにおけるデータギャップ補完方法

特性が規則的なパターンを示すカテゴリーの場合、試験が行われていない物質の特性は相関式から算出する。一方、特性が類似するカテゴリーの場合、試験が行われていない物質の特性は類似物質の特性の平均値として算出する (Read-across)。



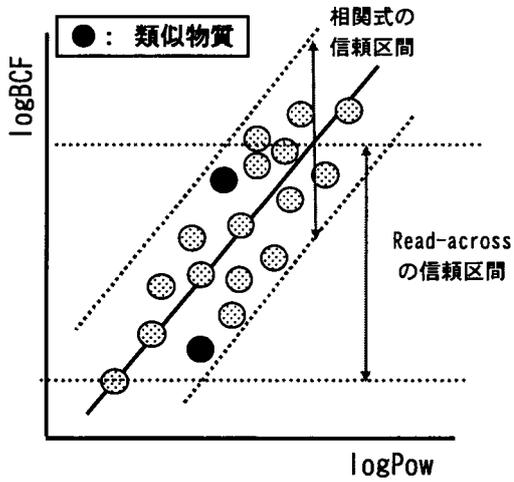
(参考3) 単純受動拡散カテゴリーカテゴリーアプローチによる予測の具体的手順

- (1) カテゴリーアプローチによる評価を行う場合は、まず、評価対象物質が単純受動拡散カテゴリーに該当するかどうかを検討する。
- (2) 評価対象物質が単純受動拡散カテゴリーに該当し、相関式の適用範囲内の場合は、相関式から $\log BCF$ の予測結果を算出する。
- (3) Read-acrossによる予測も行うため、単純受動拡散カテゴリーに該当する物質の中から類似物質を選定する。類似物質の選定方法は評価者の判断に依存するため、カテゴリーアプローチの評価報告書等には第三者が確認できるよう類似物質の選定方法を記載しておく。

※Read-across で予測するためには信頼区間の算出が可能な2物質以上の類似物質の試験データが必要。

(4) 予測式と Read-across の両方により予測可能な場合、予測結果の信頼区間の幅が狭い方の予測結果を優先する（下図参照）。

a) 相関式の予測結果を優先



b) Read-acrossの予測結果を優先

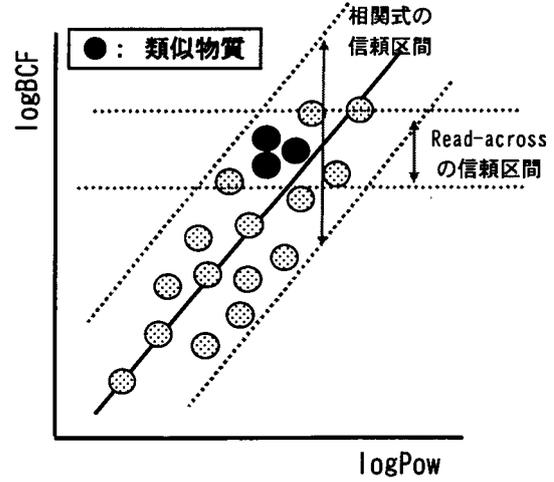


図. 相関式と Read-across による予測結果の比較方法

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
[単純受動拡散カテゴリー]

nite

平成 21 年 10 月 20 日

(独) 製品評価技術基盤機構

化学物質管理センター

実施体制

本報告書に記載されている「単純受動拡散カテゴリー」は、NITE 構造活性相関委員会においてレビューが行われた。当委員会の委員名簿と開催記録を以下に示す。

構造活性相関委員会名簿(就任時期)

米澤 義堯(委員長)	(独)産業総合技術研究所 安全科学研究部門(平成 16 年 4 月)
赤松 美紀	京都大学大学院 農学研究科 准教授(平成 16 年 4 月)
岩田 光夫	(独)産業総合技術研究所 安全科学研究部門 主任研究員(平成 20 年 12 月)
内田 直行	日本大学 生物資源科学部 教授(平成 20 年 12 月)
大川 秀郎	福山大学 生命工学部 教授(平成 16 年 4 月)
齋藤 昇二	住友化学株式会社 生物環境科学研究所 主席研究員(平成 18 年 12 月)
茂岡 忠義	横浜国立大学大学院 環境情報研究院 特任教授(平成 21 年 8 月)
田中 明人	兵庫医療大学 薬学部 教授(平成 20 年 12 月)

開催記録

平成 20 年度	第 1 回構造活性相関委員会(平成 20 年 9 月 25 日)
	第 2 回構造活性相関委員会(平成 20 年 12 月 15 日)
	第 3 回構造活性相関委員会(平成 20 年 3 月 23 日)
平成 21 年度	第 1 回構造活性相関委員会(平成 21 年 8 月 4 日)

目次

1. はじめに	1
2. 生物濃縮性におけるカテゴリーの考え方	2
3. 単純受動拡散カテゴリーの考え方	3
4. 単純受動拡散カテゴリーの定義	4
5. 化審法既存化学物質(データセット)と単純受動拡散カテゴリー該当物質の logKow と logBCF の関係	4
6. 生物濃縮性の予測方法および予測式	5
7. 化審法新規化学物質によるバリデーション結果	7
8. 単純受動拡散カテゴリーに該当する未点検既存化学物質の生物濃縮性予測例	8
9. 既存の構造活性相関ソフトウェアと予測式(2)による予測結果の比較	10
10. 単純受動拡散カテゴリー該当物質の記述子を用いた式による生物濃縮性予測の論文報告例	13
11. 解析に使用したデータおよびソフトウェア	13
12. 参考文献	14
別添	15

1. はじめに

これまで我が国における化学物質の安全性評価は、昭和 48 年に施行された「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)に基づいて審査されてきた。この化審法により、新規の化学物質は製造者に生分解性、蓄積性、28 日間反復投与毒性などの安全性評価が義務付けられている。また、化審法第 2 条に規定されている法律制定以前の既存化学物質(約 2 万物質)の生分解性・蓄積性に係る実測試験は国が行ってきたが、これまでに取得された実測データは 2,000 物質に満たない。これらの実測試験を行うには膨大な時間・労力・経費がかかるため、実測試験に変わる方法としてカテゴリーアプローチや構造活性相関手法の活用が検討されている。

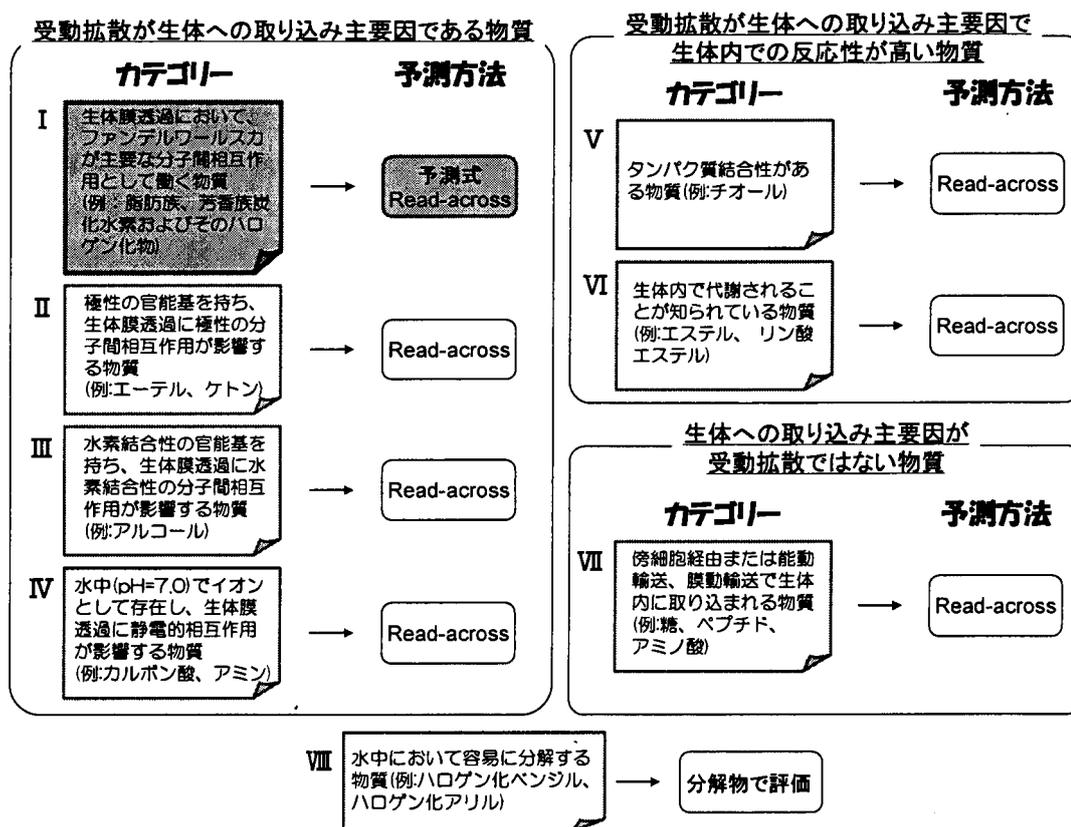
独立行政法人製品評価技術基盤機構(以下「NITE」という)は、これらの実測試験に代わる方法として構造活性相関手法に関する取り組みを開始し、平成 16 年度に NITE 内で設立された構造活性相関委員会において、生分解性・蓄積性における構造活性相関手法の活用について検討を開始した。平成 16、17 年度に生分解性・蓄積性における構造活性相関モデルの調査および既存のソフトウェアのバリデーション¹⁾と選定を行い、平成 17~19 年度に選定した構造活性相関ソフトウェアによる未点検既存化学物質の実測試験の優先順位付けを行った。この結果は、未点検既存化学物質における実測試験実施物質の選定に役立てられた。平成 19 年度~現在においては、未点検既存化学物質の優先順位付けに限らず、化学物質のリスク評価におけるハザード評価の第一段階として用いることができる生分解性・蓄積性の構造活性相関手法について検討を行っており、特に現在世界的に検討が進められている“カテゴリーアプローチ”を活用した予測手法について検討を行っている。

本報告書は、化審法の既存化学物質安全性点検の濃縮度試験データ²⁾を基に、NITE で蓄積性におけるカテゴリーアプローチの検討を行い、“単純受動拡散カテゴリー”に分類される化学物質の定義および予測方法について、報告書としてまとめたものである。

2. 生物濃縮性におけるカテゴリーの考え方

化学物質の生物濃縮性において、物質の生体内への取り込みメカニズム(生体膜透過におけるメカニズムと分子間相互作用の違い)、反応性(タンパク質結合性、生体内における代謝など)の違いによって、生物濃縮の挙動は異なる。生体内への取り込みメカニズムと反応性の違いによって物質を大まかに分類すると、生物濃縮性におけるカテゴリー分類は Scheme1 のようになると考えられる。

化学物質の生体内への取り込みは、生体膜透過におけるメカニズムと分子間相互作用の違い(3.参照)によって挙動が異なるため、それぞれを別カテゴリーとして考える必要がある。(Scheme1 の I~IV、VII)。また、生体内での反応性が高い「タンパク質結合性がある物質」や「生体内で代謝されやすい物質」は、それぞれ「タンパク質と結合して生体内に蓄積されやすい」、「代謝反応によって代謝物を生成し、生体内から排出されやすい」傾向にある。そのため、これらの物質も別カテゴリーとして取り扱う必要がある(Scheme1 の V、VI)。「水中において容易に分解する物質」は、分解物で生物濃縮性を評価する必要がある(Scheme1 の VIII)。



* 物質例は、該当するメカニズムが支配的に働くと考えられる物質である。また、物質によっては複数のカテゴリーに該当するものもある。

Scheme1 生物濃縮性におけるカテゴリー分類の全体像(イメージ)

3. 単純受動拡散カテゴリーの考え方

魚類における濃縮度試験において、化学物質の魚体内への取り込みは、主に鰓の生体膜を透過することによって起こると考えられている。鰓の生体膜からの透過機序としては、主に以下の4つの経路が考えられる^{3),4)}。

- ① 呼吸細胞経由の濃度勾配による取り込み
- ② 傍細胞経由による取り込み
- ③ 非呼吸細胞(塩類細胞など)経由の能動輸送による取り込み
- ④ 膜動輸送による取り込み

一般的な化学物質は呼吸細胞経由の濃度勾配(受動拡散)によって、生体内に取り込まれる(透過機序①)。①のメカニズムにおいては、分子の疎水性が重要な因子となる。また、生体膜には細孔が存在し、分子サイズが小さい水溶性の物質は、この細孔を水分子と共に透過することで生体内に取り込まれる(透過機序②)。この細孔の大きさは直径約4Åで、水の吸収に伴って拡大すると推測されている⁵⁾。一方、ごく一部の生体に必要な物質またはタンパク質は、単純な拡散ではなく、トランスポーターによる特異的な輸送機構(透過機序③)やエンドトシス(endocytosis)と呼ばれる細胞表面で生体膜の一部が陥入し、物質が膜内に取り込まれる過程(透過機序④)を経て、生体内に取り込まれる⁶⁾。

ここで受動拡散が取り込みの支配要因となる物質の魚類における生物濃縮性($\log BCF^{*1}$)は、物質の疎水性を表すパラメータの一つである $\log Kow^{*2}$ と相関があることがよく知られている^{7),8)}。理論上、 $\log Kow$ と $\log BCF$ が特に良好な相関を持つ物質は、物質の生体膜透過における濃度勾配以外の影響因子が少ない、すなわち水中の水分子、生体膜のリン脂質などの分子との相互作用が弱い物質であると考えられる。

膜透過における物質の分子間相互作用としては、以下の4つが考えられる⁹⁾。

- A. ファンデルワールス力(基本的に全ての物質に働く)
- B. 極性相互作用(主に極性の官能基を持つ物質に働く)
- C. 水素結合性相互作用(主に水素結合性の官能基を持つ物質に働く)
- D. 静電的相互作用(主にイオン性の物質に働く)

一般的に $D > C > B > A$ の順で分子間相互作用が強く、ファンデルワールス力は全ての物質に働くが、非常に弱い力であることから、生体膜透過に与える影響は少ない⁹⁾。従って、ファンデルワールス力が主要な分子間相互作用として働く、イオン性、水素結合性、極性の官能基を持たない物質は、水分子、リン脂質などの分子との相互作用が弱いため、単純な受動拡散によって生体内に取り込まれ、 $\log Kow$ を記述子とした予測式を用いて生物濃縮性を予測することができる。

*1 化学物質の魚体中濃度と水中濃度との比($[\text{魚体中濃度}]/[\text{水中濃度}]$)の対数値

*2 水と1-オクタノールの2つの溶媒層に化学物質を加えて、平衡に達したときの濃度比
($[\text{1-オクタノール中の物質濃度}]/[\text{水中の物質濃度}]$)の対数値

4. 単純受動拡散カテゴリーの定義

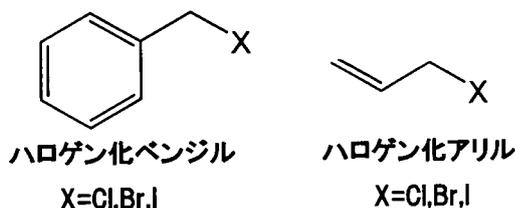
単純受動拡散カテゴリー(以下、当カテゴリー)には、ファンデルワールス力が主要な分子間相互作用である物質(イオン性、水素結合性、極性の官能基を持たない物質)が該当する。

今回データセットに用いた化審法既存化学物質(373物質)(11.参照)では、以下の2つの物質群 i、ii が該当することを確認した(別添 Table1~3 参照)。

- i. 芳香族炭化水素およびそのハロゲン化物
- ii. 脂肪族炭化水素およびそのハロゲン化物

ただし、以下の物質はカテゴリーⅧ(Scheme1 参照)に該当するため、適用範囲外である。

- ① 水中で容易に反応する物質(例えば、ハロゲン化ベンジル、ハロゲン化アリル)¹⁰⁾



また、logKow と logBCF の相関が弱くなる傾向にある以下の物質群は、QSAR 式による予測の適用範囲外とした。

- ② logKow(計算値)^{*3} ≥ 6 または logKow(実測値) ≥ 6 の物質 (別添 Fig.1 参照)
- ③ 分子サイズが大きく、生体膜透過における拡散速度が遅くなる物質(Dmax^{*4} ≥ 11 Å)^{*5} (別添 Fig.2 参照)

*3 logKow(計算値) : KOWWIN ver.1.67 を用いて算出される値

*4 Dmax : 物質の安定構造における最大直径の値

Database Manager 4.3 ver.1.3 を用いて算出

計算条件: Conversion mode: Automated OASIS

Conformer generation: Rapid

Calculation method: AM1

*5 他の立体効果のパラメータを用いる場合もある

5. 化審法既存化学物質(データセット)と単純受動拡散カテゴリー該当物質の logKow と logBCF の関係

データセット 373 物質の中で、当カテゴリーに該当する 87 物質をトレーニングセットとして用いた。このトレーニングセット(87 物質)の中で、予測式の作成に用いた 54 物質、分子サイズが小さい(Dmax < 8 Å)の 23 物質、logKow^{*3} ≥ 6 または Dmax^{*4} ≥ 11 Å の 10 物質をそれぞれ別添 Table1~3 に示す。また、データセット(373 物質)とトレーニングセットの中で予測式に使用した 54 物質と Dmax < 8 Å の 23 物質の logKow(計算値)^{*3} vs. logBCF プロットを Fig.1 に示す。

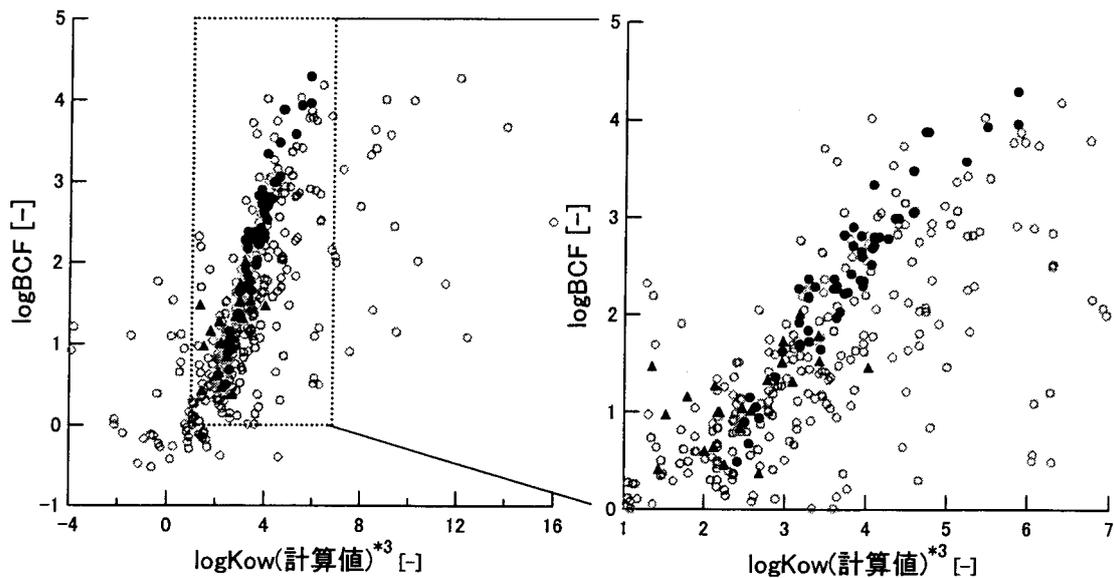


Fig.1 logKow(計算値) vs. logBCF プロット(左:全体図、右:拡大図)

[○:データセット(373物質)、●:トレーニングセット(予測式に使用した54物質)、
▲:トレーニングセット(Dmax<8Å 23物質)]

6. 生物濃縮性の予測方法および予測式

①logKow を記述子とした予測式による予測

Fig.1を見ると、分子サイズが小さい物質(Dmax<8Å)は、logKow と logBCF の相関が弱いことがわかる。これらの分子サイズが小さい物質は、濃縮性が低い物質であるため、濃縮度試験における実測誤差が大きいことや、物質の揮発性、代謝の影響等の様々な要因によって、logBCF の実測値にバラつきが生じていることも考えられる。そのため、これらの物質を除いた54物質を用いて、予測式の作成を行った。

予測式の作成に用いた54物質のlogKow(計算値) vs. logBCF(実測値)プロット、logKow(実測値) vs. logBCF(実測値)プロットを示す(Fig.2,3)。予測式におけるR²、Q²はそれぞれ決定係数、クロスバリデーション(leave-one-out法)後の決定係数である。プロットにおける実線は予測式、点線は予測式から算出されるlogBCF(予測値)の95%信頼区間である。また、各logKow(計算値)におけるlogBCF(予測値)の95%信頼区間上限、下限値をTable1,2に示す。

当カテゴリーに該当する物質のlogKow と logBCF の関係式として、Fig.2、3から予測式(1)、(2)が導き出される。logKow が実測されている場合には式(1)、実測されていない場合には式(2)を用いてlogBCFを予測することができる。

$$\log\text{BCF} = 1.05\log\text{Kow}(\text{実測値}) - 1.71 \quad \dots (1)$$

$$\log\text{BCF} = 1.03\log\text{Kow}(\text{計算値})^3 - 1.48 \quad \dots (2)$$

②Read-across による予測

当カテゴリーにおいては、logKow と logBCF との関係式による予測を行うと同時に、トレーニングセット(87物質)を用いてRead-acrossによる予測も行い、両者の結果から

生物濃縮性予測を行う。

Read-across は、未試験物質の有害性等を同じカテゴリー内に属する有害性等が既知の類縁物質(分子構造、物理化学的性状が類似な物質)から予測する方法で、OECD (Q)SAR Application Toolbox¹¹⁾で提唱されている予測手法である。logBCF(予測値)は、選択した類縁物質の logBCF(実測値)の平均値から算出する(予測例：8.の②参照)。有害性等が既知の類縁物質がない場合には、Read-across による予測を行うことができない。

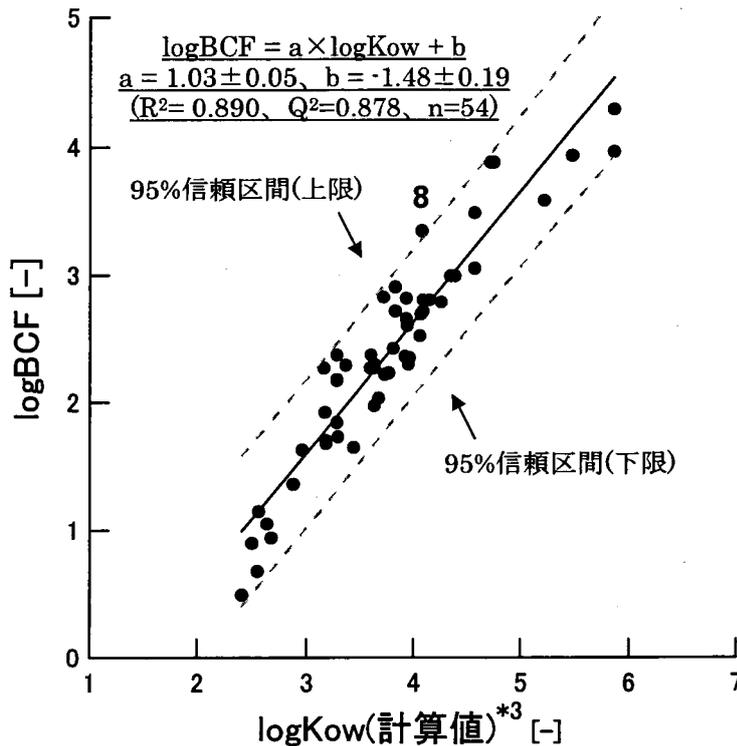


Fig.2 logKow(計算値) vs. logBCF(実測値)プロット(54 物質)

Table1 logKow(計算値)^{*3}とlogBCF(予測値)と95%信頼区間の上限値または下限値

logKow (計算値) [-]	logBCF (予測値) [-]	logBCF 95%信頼区間 (上限値)	logBCF 95%信頼区間 (下限値)
2.0	0.58	1.18	-0.02
2.5	1.10	1.68	0.51
3.0	1.61	2.19	1.03
3.5	2.13	2.70	1.55
4.0	2.64	3.21	2.07
4.5	3.16	3.73	2.58
5.0	3.67	4.26	3.08
5.5	4.19	4.78	3.59
6.0	4.70	5.32	4.08

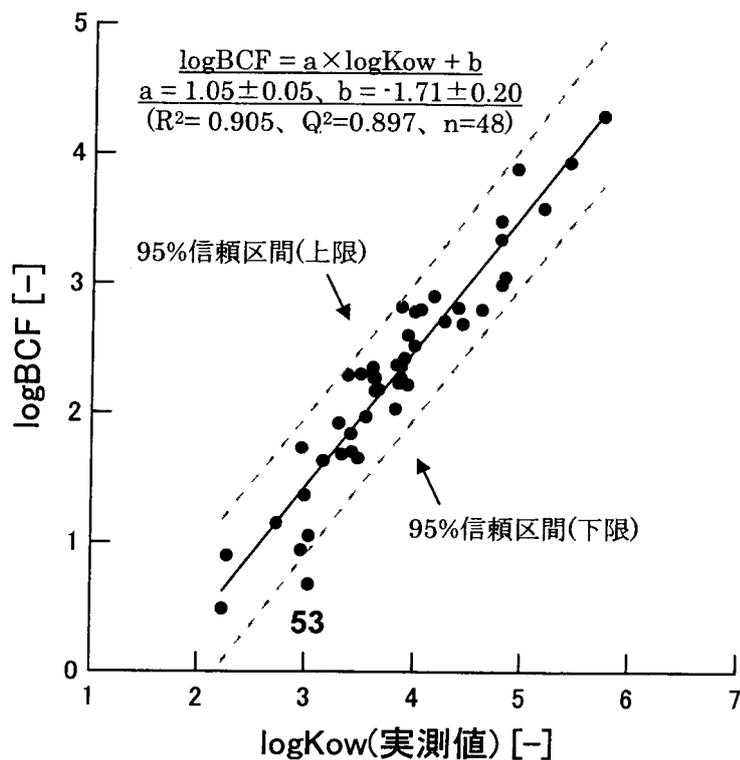


Fig.3 logKow(実測値) vs. logBCF(実測値)プロット(48 物質)

Table2 logKow(計算値)^{*3}とlogBCF(予測値)と95%信頼区間の上限値または下限値

logKow (実測値) [-]	logBCF (予測値) [-]	logBCF 95%信頼区間 (上限値)	logBCF 95%信頼区間 (下限値)
2.0	0.39	0.96	-0.18
2.5	0.92	1.47	0.36
3.0	1.44	1.98	0.90
3.5	1.97	2.50	1.43
4.0	2.49	3.03	1.95
4.5	3.02	3.56	2.47
5.0	3.54	4.09	2.99
5.5	4.07	4.63	3.50
6.0	4.59	5.17	4.01

7. 化審法新規化学物質によるバリデーション結果

化審法新規化学物質(11.参照)の中で当カテゴリ定義に該当し、(対水溶解度)≥(試験濃度)の条件に当てはまる物質は8物質であった。式(2)から算出したlogBCFの予測値と実測値のプロットを次ページのFig.4に示す。この8物質の予測結果を評価したところ、1物質(A)を除いて良好な予測結果が得られた。予測値が大きく外れた物質Aは、ほとんどの炭素にフッ素が置換している鎖状化合物であった。この物質Aはトレーニングセットに含まれている類縁物質が少ないため、予測式による予測が大きく外れたと考えられる。また、類縁物質がないことからRead-acrossによる予測を行うことができないため、この物質は「予測できない物質」とであると判断した。

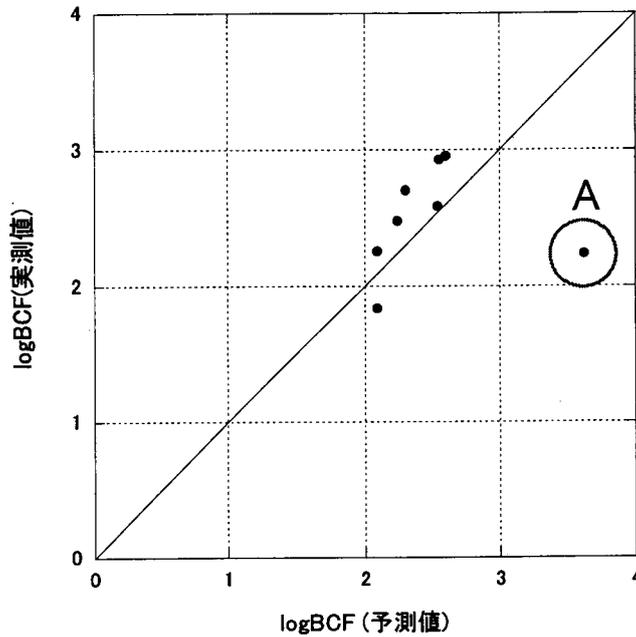


Fig.4 化審法新規化学物質によるバリデーション結果

8. 単純受動拡散カテゴリーに該当する未点検既存化学物質の生物濃縮性予測例

当カテゴリー定義に該当する未点検既存化学物質と式(2)から算出された logBCF(予測値)を別添 Table4 に示す。また、当カテゴリーに該当する未試験物質の生物濃縮性予測のケーススタディとして、o-トリフルオロメチルクロロベンゼン(別添 Table4 の No.97、以下 o-TFCB という)の予測例を示す。

①logKow(計算値)*3 と予測式(2)を用いた予測

o-TFCB の logKow(計算値)*3 は 3.60 である。この値を式(2)に代入すると、

$$\log\text{BCF}(\text{予測値}) = 1.03 \times 3.60 - 1.48 = 2.228 \dots \approx 2.23$$

logKow(計算値)=x とおくと、logBCF の 95%信頼区間は次式(3)より算出される。

$$[95\% \text{信頼限界}] = \sqrt{Ve \left\{ 1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{Sxx} \right\}} \times t(\text{自由度}, 0.05) \quad (3)$$

ここで、Ve (誤差分散)=0.0809、n(データ数)=54、Sxx(xの平方和)=32.024、 \bar{x} (xの平均値)=3.77 である。また t分布表より、($\alpha=0.05$ 、自由度 53、両側)のとき $t=2.006$ 、これら全ての値を式(3)に代入すると、 $x_0=3.60$ のときの[95%信頼限界]は、

$$[95\% \text{信頼限界}] = \sqrt{0.0809 \times \left\{ 1 + \frac{1}{54} + \frac{(3.60 - 3.77)^2}{32.024} \right\}} \times 2.006 = 0.576 \dots = 0.58$$

よって、予測式(2)から算出される o-TFCB の logBCF(予測値)は

$$\log\text{BCF}(\text{予測値}) = 2.23 \pm 0.58$$

②Read-across による予測

o-TFCB (logKow(計算値)*3=3.60)の Read-across に用いる類縁物質は、①分子構造の類似性(基本骨格、置換基)、②物理化学的性質(logKow、分子量など)の両方の観点から選択する必要がある。そこで、トレーニングセット(87 物質)の中から、以下の条件に基づいて類縁物質の選択を行った。

1. ベンゼン 2 置換体
2. 置換基はハロゲンまたはトリフルオロメチル基
3. 類縁物質の logKow(計算値)*3 が[o-TFCB の値]±0.5

その結果、以下の 6 物質を o-TFCB の類縁物質として選択した(Table3)。

これらの 6 物質の logBCF の平均値を算出し、o-TFCB の logBCF(予測値)とする。

$$\log BCF(\text{予測値}) = \frac{(2.37 + 2.23 + 2.36 + 2.18 + 2.17 + 1.84)}{6} = 2.19$$

また、t 分布表より($\alpha=0.05$ 、自由度 5、両側)のとき $t=2.571$ 、6 物質の logBCF の標準誤差(S.E.)= 0.0787 より、logBCF(予測値)の 95%信頼限界は、

$$[95\% \text{信頼限界}] = 0.0787 \times 2.571 = 0.20$$

よって、Read-across から算出される o-TFCB の logBCF(予測値)は

$$\log BCF(\text{予測値}) = 2.19 \pm 0.20$$

Table3 o-トリフルオロメチルクロロベンゼンと選択された類縁物質(6 物質)

No.	予測対象物質	25	27	35
CAS No.	88-16-4	98-15-7	106-37-6	402-31-3
物質名	o-トリフルオロメチルクロロベンゼン	m-トリフルオロメチルクロロベンゼン	p-ジブロモベンゼン	m-キシレン ヘキサフルオリド
分子構造				
logBCF	実測値	-	2.37	2.23
	予測値 (相関式)	2.23±0.58	2.23	2.40
logKow	実測値	3.53	2.14	3.85
	KOWWIN	3.60	3.60	3.77
分子量	180.6	180.6	235.9	214.1
沸点 [°C]	152	138.1	220.4	116.0
対水溶解性 [mg/l]	<1000	33	12	28
Dmax [Å]	8.5	9.3	10.1	9.8

No.	37	38	42
CAS No.	95-50-1	541-73-1	106-46-7
物質名	o-ジクロロベンゼン	m-ジクロロベンゼン	p-ジクロロベンゼン
分子構造			
logBCF	実測値	2.18	2.17
	予測値 (相関式)	1.90	1.90
logKow	実測値	3.66	3.63
	KOWWIN	3.28	3.28
分子量	147.0	147.0	147.0
沸点 [°C]	180.5	173.0	173.0
対水溶解性 [mg/l]	100	75	49
Dmax [Å]	8.3	8.7	9.5

③o-TFCB の生物濃縮性の評価

o-TFCB の $\log BCF$ は予測式(2)、Read-across を用いた予測によって、それぞれ 2.23 ± 0.58 、 2.19 ± 0.20 と予測された。両者の値の最大値は 3 を超えないことから、この物質の生物濃縮性は「高濃縮性ではない」と判断する。

9. 既存の構造活性相関ソフトウェアと予測式(2)による予測結果との比較

トレーニングセット(87 物質)の中で、予測式の作成に用いた 54 物質の生物濃縮性を既存の構造活性相関ソフトウェア(3 モデル、11.参照)を用いて予測を行い、予測式(2)による予測結果との比較を行った。BCFWIN、Baseline モデルでは 全 54 物質が予測され、CERI モデルではフッ素化合物 4 物質(No.4,25,27,48)を除く 50 物質が予測された。予測式(2)と既存の構造活性相関ソフトウェア(3 モデル)の $\log BCF$ の予測値と実測値のプロットを Fig.5-8 に示す。Fig における R^2 、S.D.はそれぞれ予測値と実測値間の決定係数、標準偏差の値である。

BCFWIN では、全 54 物質に対して予測式($\log BCF = 0.77 \log Kow - 0.70$)を用いて、CERI モデルではフッ素化合物以外の 50 物質に対して予測式($\log BCF = 0.76 \log Kow - 0.76$ または $\log BCF = 0.76 \log Kow - 1.76$)を用いた予測が行われた。この 2 モデルでは、「単純受動拡散カテゴリー」以外の生物濃縮の挙動が異なる物質も含めたトレーニングセットから予測式が作成されている。そのため、これらの予測式の傾きは当カテゴリーの予測式(2)よりも小さく、このことが原因で $\log Kow \geq 2$ の物質では予測値よりも実測値の方が高い傾向にあったと考えられる。その一方で、当カテゴリーの予測式(2) ($\log BCF = 1.03 \log Kow - 1.48$)を用いた予測では、 $\log BCF \geq 2$ の物質においても比較的良好的な結果が得られた。

Baseline モデルでは、他の 2 つのモデルよりも予測精度が悪い傾向が得られた。このモデルは、いくつかの物質において生体内における代謝の影響を考慮した予測を行う。この代謝の予測には、ラットの代謝データが用いられているが、魚類の代謝とは反応または反応速度に種差があることが予想される。この代謝影響の過大評価によって、予測精度が低下したと考えられる。

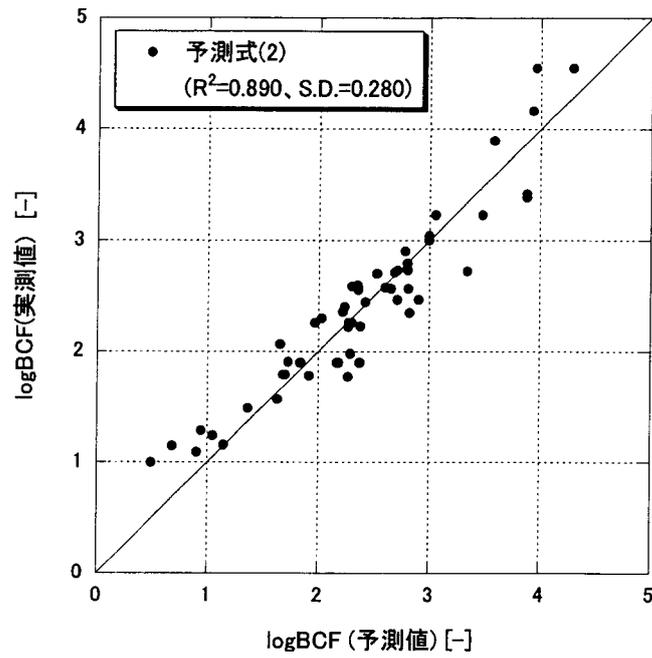


Fig.5 予測式(2)による予測結果(54 物質)

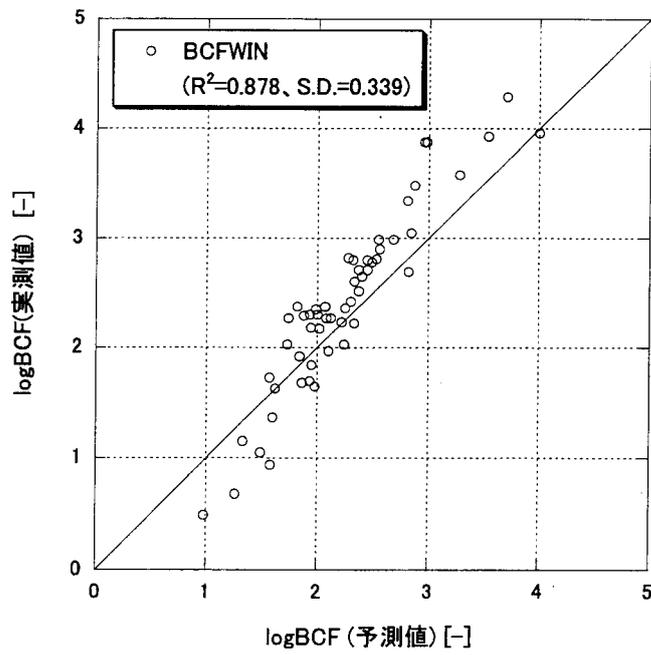


Fig.6 BCFWIN による予測結果(54 物質)

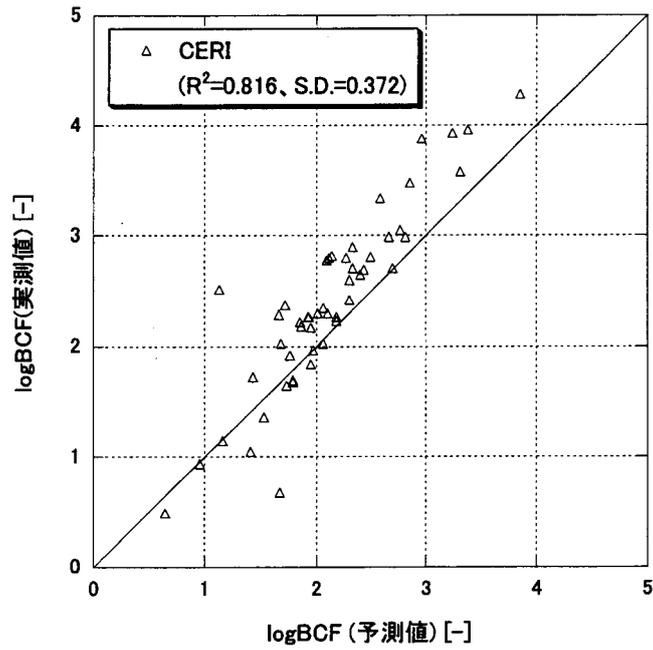


Fig.7 CERI モデルによる予測結果(50 物質)

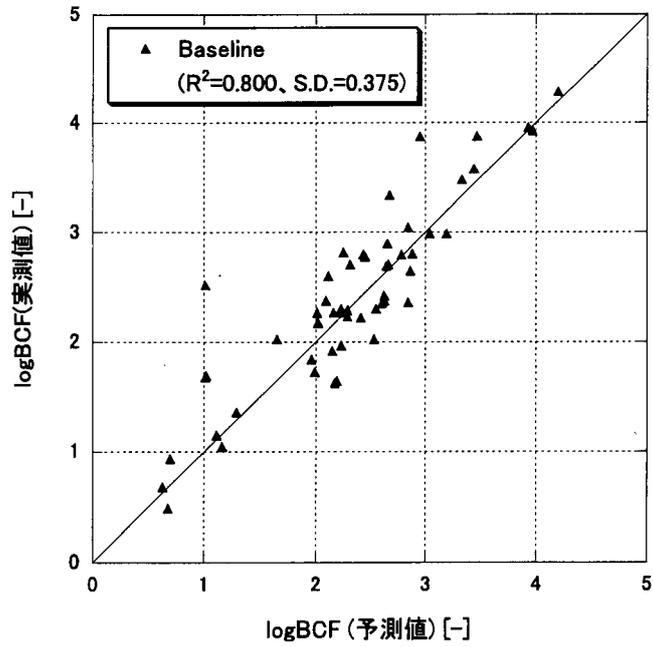


Fig.8 Baseline モデルによる予測結果(54 物質)

10. 単純受動拡散カテゴリー該当物質の記述子を用いた式による生物濃縮予測の論文報告例

単純受動拡散カテゴリー該当物質の記述子を用いた式による生物濃縮性予測では、対象物質として芳香族炭化水素、クロロベンゼン類、予測に用いる記述子として logKow(計算値または実測値)、無機性値(Σi)、有機性値(Σo)などを用いた研究が今までに報告されている(Table4)。

Table4 QSAR 式による生物濃縮性予測の研究例

対象物質	トレーニングセット の物質数	記述子	予測式	参考文献
芳香族炭化水素	17	logKow	$\log BCF = 0.714 \log Kow - 0.920$	12
クロロベンゼン類	6	logKow	$\log BCF = 3.411 \log Kow - 0.264 (\log Kow)^2 - 5.513$	13
クロロベンゼン類	6	Σi Σo	$\log BCF = -0.046 \Sigma i + 0.0256 \Sigma o$ $\log BCF = 71.5 \Sigma i / \Sigma o - 9.25$	14

11. 解析に使用したデータおよびソフトウェア

(1) 本報告書で用いた物質および濃縮度試験データ

1. データセット:

化審法既存点検による濃縮度試験結果が公表されている全 783 物質(平成 20 年 8 月 12 日まで)²⁾の中で、以下の条件を満たす 373 物質を解析データに使用した。

- 1) 有機低分子量かつ濃縮度試験が化合物単体で行われているもの (662 物質)
- 2) 対水溶解度が明確に測定されており、対水溶解度より低い濃度で濃縮度試験がなされたもの (417 物質)
- 3) 測定濃度が検出限界以下でなく、BCF 値が明確に測定されているもの(各物質の BCF 値には、最低濃度区の後半 3 週における魚 2 匹 (6 点) の濃縮倍率の平均値を使用した。測定結果に「検出限界以下」の記述がある場合には、その上の濃度区のデータを解析に用いた)

2. バリデーションセット:

昭和 50 年度から平成 19 年度までに届け出られた化審法新規化学物質の中で、以下の条件を満たす 906 物質の濃縮度試験結果をバリデーションに使用した。

- 1) 有機低分子量かつ濃縮度試験が化合物単体で行われているもの
- 2) 測定濃度が検出限界以下でなく、BCF 値が明確に測定されているもの(各物質の BCF 値には、最低濃度区の後半 3 週における魚 2 匹 (6 点) の濃縮倍率の平均値を使用した。測定結果に「検出限界以下」の記述がある場合には、その上の濃度区のデータを解析に用いた)

3. 予測例に用いた未点検の化審法既存化学物質

濃縮度試験が未実施の第 2 類から第 5 類に属する化審法既存物質で、平成 13 年度実績における年間の製造・輸入量¹⁵⁾の合計が 10t 以上確認されたもののうち、化学構造が特定可能な物質を用いた。

(3) 本報告書で利用したソフトウェア

*1 logKow(計算値)の算出:

KOWWIN ver.1.67 (US EPA)

*2 分子の安定構造における最大直径(Dmax)の算出:

Database Manager 4.3 ver.1.3 (Laboratory of Mathematical Chemistry)

計算条件: Conversion mode: Automated OASIS

Conformer generation: Rapid

Calculation method: AM1

*3 データ解析およびグラフ描画

Igor Pro ver.5.05 (Wave Metrics)

Kaleida Ver.3.6 (Synergy Software)

OECD (Q)SAR Application Toolbox ver1.0(Laboratory of Mathematical Chemistry)

*4 構造活性相関ソフトウェア

BCFWIN ver.2.15 (US EPA)

化学物質特性予測システム ver.2.18[CERI モデル] ((財)化学物質評価研究機構)

Catabol ver.5.100[Baseline モデル] (Laboratory of Mathematical Chemistry)

12. 参考文献

1) OECD 原則に基づく構造活性相関モデルのバリデーション

BIOWIN5: http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/biowin5.pdf

生分解性予測システム: http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/ceri.pdf

Catabol: http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_pdf/catabol.pdf

2) <http://www.safe.nite.go.jp/japan/db.html>

3) WL. Hayton, *Environmental Toxicology and Chemistry*, **9**(2), 151-157(1990).

4) J. Isaia, *The Journal of Physiology*, **326**(1), 297-307(1982).

5) 構造活性相関懇話会編, 薬物の構造活性相関 ドラッグデザインと作用機作研究への指針, 南江堂, 365-371(1979).

6) 加藤 隆一, 臨床薬物動態学 改訂第3版, 南江堂, 5-8(2003).

7) M. CRAIG BARBER, *Environmental Toxicology and Chemistry*, **22**(9), 1963-1992 (2003).

8) 若林 明子, 化学物質と生態毒性 改訂版, 丸善, 193-196(2003).

9) J.N. Israelachvili, 分子間力と表面力 第2版, 朝倉書店, 393-400(1996).

10) W. Mabey, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **7**, 383-415(1978).

11) http://www.oecd.org/document/54/0,3343,en_2649_34379_42923638_1_1_1_1.00.html

12) Ogata M., *Bull. Environ. Contam. Toxicol.*, **33**, 561-567 (1984).

13) Konemann H., *Chemosphere*, **9**, 3-19 (1980).

14) Matsuo M., *Chemosphere*, **9**, 409-413 (1980).

15) http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/a9/2.htm

1. トレーニングセットおよび単純受動拡散カテゴリーに該当する未試験物質のリスト

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質))

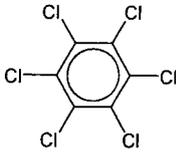
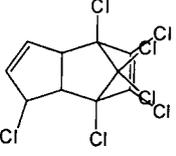
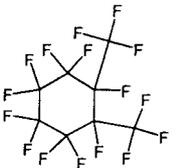
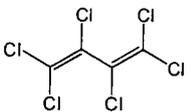
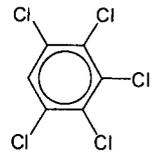
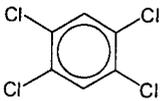
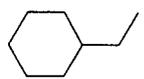
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
1	118-74-1	ヘキサクロルベンゼン		285	4.29	5.74	5.86	0.005	9.5
2	76-44-8	ヘプタクロル		373	3.96	6.13	5.86	0.0343	10.0
3	4904-61-4	1, 5, 9-シクロ ドデカトリエン		162	3.93	5.43	5.48	3	9.5
4	306-98-9	ペルフルオロー 1, 2-ジメチル シクロヘキサン		400	3.88	-	4.75	0.00241- 0.00296	9.3
5	87-68-3	六塩化ブタジエン [別名:ヘキサクロロー 1, 3-ブタジエン]		261	3.88	4.94	4.72	2.91	9.8
6	608-93-5	ペンタクロロベンゼン		250	3.58	5.19	5.22	0.12	9.5
7	95-94-3	1, 2, 4, 5-テトラ クロロベンゼン		216	3.48	4.79	4.57	0.606	9.5
8	1678-91-7	エチルシクロヘキサン		112	3.34	4.79	4.08	6.6	9.6

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

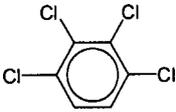
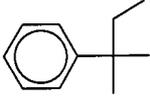
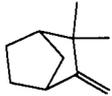
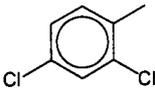
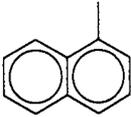
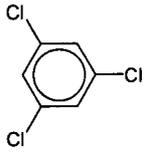
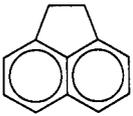
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ³ (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ⁴ [A]
9	634-66-2	1, 2, 3, 4-テトラ クロロベンゼン		216	3.05	4.83	4.57	0.71	9.5
10	2049-95-8	tert-アミルベンゼン [別名: tert-ペンテ ルベンゼン]		148	2.99	-	4.39	10.5	9.4
11	79-92-5	カンフェン		136	2.99	4.80	4.35	4.2	8.1
12	95-73-8	2, 4-ジクロロトルエ ン		161	2.90	4.17	3.83	25	9.2
13	90-12-0	1-メチルナフタレン		142	2.82	3.87	3.72	25.8	9.4
14	108-70-3	1, 3, 5-トリクロロ ベンゼン		181	2.81	4.40	3.93	5.61	8.7
15	1712-70-5	4-イソプロペニル クロロベンゼン		153	2.80	4.62	4.09	4.2	10.6
16	83-32-9	アセナフテン		154	2.80	4.05	4.15	0.57	9.4

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

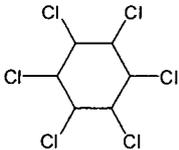
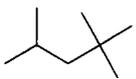
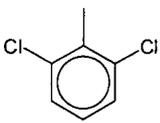
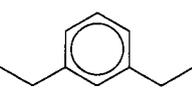
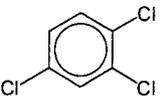
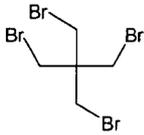
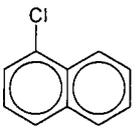
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [A]
17	608-73-1	ヘキサクロロシクロヘキサン		291	2.78	3.99	4.26	8	9.6
18	540-84-1	2, 2, 4-トリメチルペンタン		114	2.71	-	4.09	0.56	8.9
19	118-69-4	2, 6-ジクロロトルエン		161	2.71	4.27	3.83	26	8.7
20	141-93-5	m-ジエチルベンゼン		134	2.69	4.44	4.07	24	10.8
21	120-82-1	1, 2, 4-トリクロロベンゼン		181	2.65	-	3.93	37.9	9.5
22	208-96-8	アセナフチレン		152	2.60	3.93	3.94	16	9.4
23	3229-00-3	1, 3-ジブromo-2, 2-ビス(ブromoメチル)プロパン		388	2.52	3.99	4.06	1.6	8.8
24	90-13-1	1-クロロナフタレン		163	2.42	3.90	3.81	22.4	9.4

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

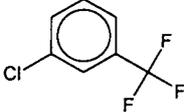
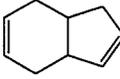
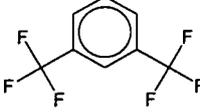
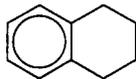
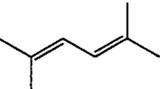
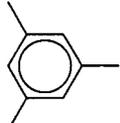
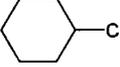
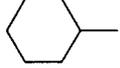
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ³³ (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ³⁴ [A]
25	98-15-7	m-トリフルオロ メチルクロロベンゼン		181	2.37	2.14	3.60	33	9.2
26	3048-65-5	3a, 4, 7, 7a- テトラヒドロ 1H-インデン		120	2.37	3.83	3.28	49	8.7
27	402-31-3	メタキシレン ヘキサフルオリド		214	2.36	3.87	3.92	28	9.8
28	119-64-2	テトラヒドロナフタリン		132	2.35	3.61	3.96	47	9.4
29	764-13-6	2, 5-ジメチルヘキ サ-2, 4-ジエン		110	2.30	3.50	3.95	32	9.8
30	108-67-8	1, 3, 5-トリメチル ベンゼン		120	2.30	3.61	3.63	47.9	8.8
31	542-18-7	クロロシクロヘキサン		119	2.29	3.38	3.36	500	8.4
32	108-87-2	メチルシクロヘキサン		98	2.27	3.87	3.59	15.1	8.1

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

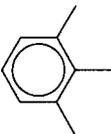
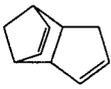
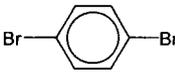
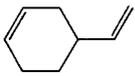
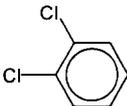
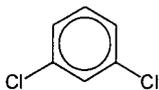
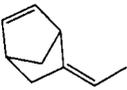
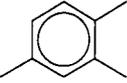
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
33	526-73-8	1, 2, 3-トリメチル ベンゼン		120	2.27	3.63	3.63	57	8.8
34	77-73-6	ジシクロペンタジエン		132	2.27	3.62	3.16	20	8.7
35	106-37-6	p-ジブロモベンゼン		236	2.23	3.85	3.77	12	10.1
36	100-40-3	4-ビニル-1- シクロヘキセン		108	2.22	3.93	3.73	50	9.6
37	95-50-1	o-ジクロロベンゼン		147	2.18	3.66	3.28	100	8.3
38	541-73-1	m-ジクロロベンゼン		147	2.17	3.63	3.28	75	8.7
39	16219-75-3	5-エチリデン-2- ノルボルネン		120	2.03	3.82	3.67	8.9	9.0
40	95-63-6	1, 2, 4-トリメチル ベンゼン		120	1.97	3.55	3.63	57	9.0

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

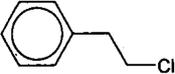
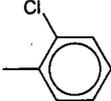
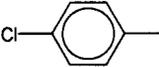
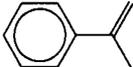
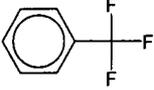
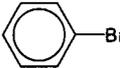
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ⁹³ (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ⁴⁴ [A]
41	91-20-3	ナフタリン		128	1.92	3.30	3.17	31.7	9.4
42	106-46-7	p-ジクロロベンゼン		147	1.84	3.41	3.28	49	9.5
43	622-24-2	(2-クロロエチル)ベンゼン		141	1.73	2.96	3.29	210	10.6
44	95-49-8	o-クロロトルエン		127	1.70	3.42	3.18	374	8.3
45	106-43-4	パラクロロトルエン		127	1.68	3.33	3.18	100	9.2
46	98-83-9	α-メチルstyレン		118	1.65	3.48	3.44	100	9.4
47	98-08-8	ベンゾトリフルオライド		146	1.63	3.16	2.96	140	8.5
48	108-86-1	ブロモベンゼン		157	1.36	2.99	2.88	100	8.7

Table1 トレーニングセット(予測式の作成に用いた化審法既存化学物質(54 物質)) [続き]

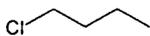
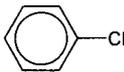
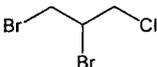
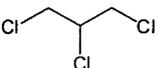
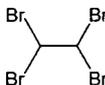
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
49	109-69-3	1-クロロブタン		93	1.15	2.73	2.56	370	8.9
50	108-90-7	モノクロロベンゼン		113	1.05	3.03	2.64	495	8.3
51	96-12-8	1, 2-ジブロモ-3-クロロプロパン		236	0.94	2.96	2.68	300	8.4
52	96-18-4	1, 2, 3-トリクロロプロパン		147.4	0.90	2.27	2.5	900	8.0
53	79-27-6	1, 1, 2, 2-テトラブロモエタン		346	0.68	3.03	2.55	680	8.2
54	109-70-6	1-ブロモ-3-クロロプロパン		157	0.49	2.23	2.41	2100	9.0

Table2 トレーニングセット(Dmax が 8 Å 未満の化審法既存化学物質(23 物質))

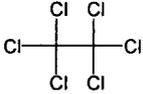
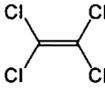
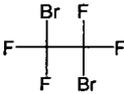
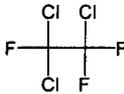
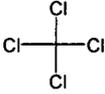
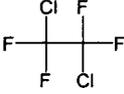
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ⁹³ (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ⁹⁴ [Å]
55	67-72-1	ヘキサクロロエタン		237	1.45	4.27	4.03	50	7.6
56	127-18-4	テトラクロロエチレン		166	1.72	3.66	2.97	150	7.6
57	110-82-7	シクロヘキサン		84	2.00	3.44	3.18	49	7.2
58	124-73-2	1, 2-ジブromo-1, 2, 2-テトラフルオロエタン		260	1.51	3.22	2.96	3	7.3
59	76-13-1	1, 1, 2-トリクロロ-1, 2, 2-テトラフルオロエタン		187	1.30	2.97	3.09	120	6.9
60	110-83-8	シクロヘキセン		82	1.50	2.93	2.96	160	7.2
61	56-23-5	四塩化炭素		154	0.83	2.83	2.44	800	6.2
62	76-14-2	1, 2-ジクロロ-1, 1, 2, 2-テトラフルオロエタン		171	1.32	2.79	2.78	130	7.0

Table2 トレーニングセット(Dmax が 8 Å 未満の化審法既存化学物質(23 物質)) [続き]

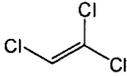
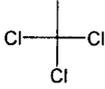
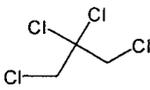
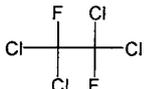
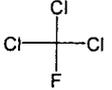
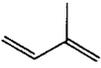
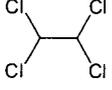
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ⁹³ (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ⁹⁴ [Å]
63	79-01-6	トリクロロエチレン		131	1.03	2.73	2.47	1100	7.6
64	71-55-6	1, 1, 1-トリクロロエタン		133	0.36	2.72	2.68	4400	6.4
65	13116-53-5	1, 2, 2, 3-テトラクロロプロパン		182	1.52	2.72	3.42	480	7.6
66	76-12-0	1, 1, 2, 2-テトラクロロ-1, 2-ジフルオロエタン		204	1.78	2.56	3.41	160	7.7
67	75-69-4	トリクロロフルオロメタン		137	1.26	2.54	2.13	1300	6.2
68	75-25-2	トリブロモメタン		253	1.14	2.54	1.79	1000	6.8
69	78-79-5	イソブレン		68	1.00	2.42	2.58	300	7.7
70	79-34-5	1, 1, 2, 2-テトラクロロエタン		168	0.99	2.39	2.19	1000	7.6

Table2 トレーニングセット(Dmax が 8 Å 未満の化審法既存化学物質(23 物質)) [続き]

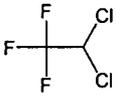
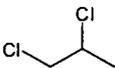
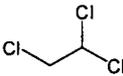
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ³³ (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ⁴⁴ [Å]
71	306-83-2	2, 2-ジクロロ-1, 1-トリフルオロエタン(フロン123)		153	0.99	2.18	2.17	2100	6.9
72	75-35-4	1, 1-ジクロロエチレン		97	0.63	2.15	2.12	210	6.4
73	78-87-5	1, 2-ジクロロプロパン		113	0.45	2.09	2.25	1000	7.6
74	79-00-5	1, 1, 2-トリクロロエタン		133	0.59	1.99	2.01	3500	7.6
75	67-66-3	トリクロロメタン		119	0.96	1.97	1.52	5000	6.2
76	74-97-5	ブロモクロロメタン		129	0.40	1.41	1.43	14000	6.5
77	75-09-2	ジクロロメタン		85	1.46	1.25	1.34	7900	6.2

Table3 トレーニングセット(logKow^{*3}≥6 または Dmax^{*4}≥11 Å の化審法既存化学物質(10 物質))

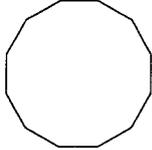
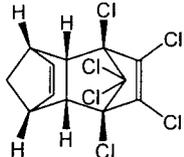
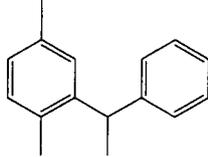
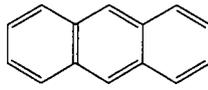
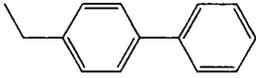
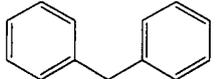
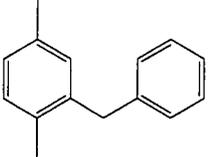
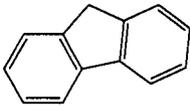
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
78	294-62-2	シクロドデカン		168.3	3.75	-	6.12	10	9.2
79	309-00-2	アルドリン		364.9	3.80	6.50	6.75	0.18	10.0
80	6165-51-1	1,4-ジメチル-2-(1-フェニルエチル)ベンゼン		210.3	2.81	5.39	5.24	96	11.4
81	120-12-7	アントラセン		178.2	3.26	4.69	4.35	1.24	11.7
82	5707-44-8	4-エチルビフェニル		182.3	2.94	5.08	4.8	1.6	13.6
83	101-81-5	ジフェニルメタン		168.2	2.81	4.14	4.02	1.41	11.2
84	13540-50-6	フェニル-キシリルメタン		196.3	3.07	-	5.11	0.684	11.5
85	105-05-5	p-ジエチルベンゼン		134.2	2.69	4.53	4.07	24.8	11.4

Table3 トレーニングセット(logKow^{*3} ≥ 6 または Dmax^{*4} ≥ 11 Å の化審法既存化学物質(10 物質))

[続き]

No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow (実測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	対水溶解性 (実測値) [mg/l]	Dmax ^{*4} [Å]
86	86-73-7	フルオレン		166.2	2.72	4.43	4.02	1.69	11.2

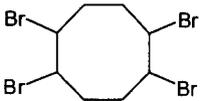
87	3194-57-8	1, 2, 5, 6-テトラ ブロモシクロオクタン		427.8	3.43	-	5.24	0.347	11.2

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質))

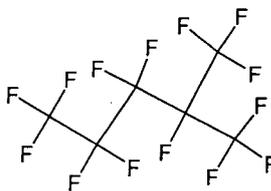
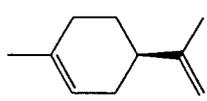
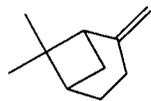
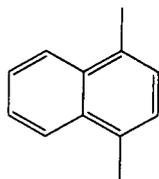
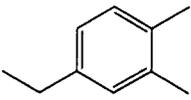
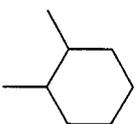
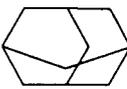
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [Å]
88	355-04-4	1,1,1,2,2,3,3,4,5,5,5-undecafluoro-4-(trifluoromethyl)pentane		338	3.99	5.31	9.94
89	5989-27-5	Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (R)-		136	3.49	4.83	10.49
90	127-91-3	Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-		136	3.00	4.35	8.75
91	571-58-4	1,4-dimethylnaphthalene		156	2.91	4.26	9.40
92	934-80-5	Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-		134	2.77	4.13	10.33
93	583-57-3	1,2-dimethylcyclohexane		112	2.65	4.01	8.20
94	281-23-2	Tricyclo[3.3.1.1 ^{3,7}]decane		136	2.58	3.94	7.17

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質)) [続き]

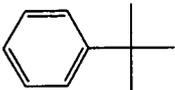
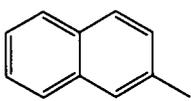
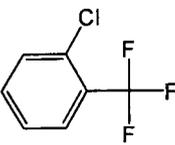
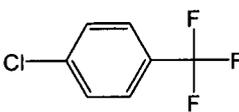
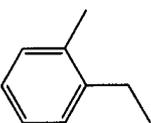
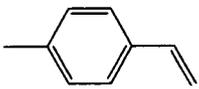
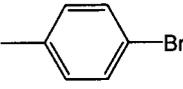
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [Å]
95	98-06-6	Benzene, (1,1-dimethylethyl)-		134	2.54	3.90	9.42
96	91-57-6	Naphthalene, 2-methyl-		142	2.35	3.72	10.36
97	88-16-4	Benzene, 1-chloro-2-(trifluoromethyl)-		181	2.23	3.60	8.54
98	98-56-6	p-trifluoro chlorobenzene		181	2.23	3.60	9.6
99	611-14-3	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-		120	2.21	3.58	9.43
100	622-97-9	Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-		118	2.06	3.44	10.38
101	106-38-7	Benzene, 1-bromo-4-methyl-		171	2.05	3.43	9.52

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質)) [続き]

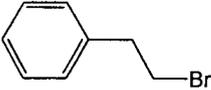
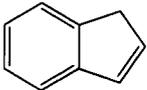
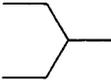
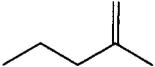
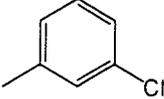
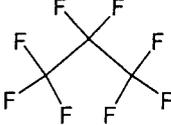
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [Å]
102	103-63-9	Benzene, (2-bromoethyl)-		185	1.99	3.37	10.87
103	95-13-6	1H-Indene		116	1.87	3.25	8.95
104	96-14-0	Pentane, 3-methyl-		86	1.83	3.21	8.90
105	763-29-1	1-Pentene, 2-methyl-		84	1.83	3.21	8.52
106	563-79-1	2-Butene, 2,3-dimethyl-		84	1.81	3.19	7.62
107	108-41-8	Benzene, 1-chloro-3-methyl-		127	1.80	3.18	8.63
108	76-19-7	Propane, octafluoro-		188	1.73	3.12	7.50

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質)) [続き]

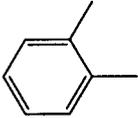
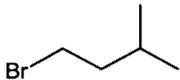
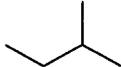
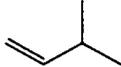
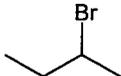
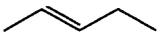
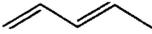
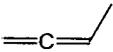
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [A]
109	95-47-6	Benzene, 1,2-dimethyl-		106	1.70	3.09	8.06
110	460-00-4	p-bromofluorobenzene		174	1.69	3.08	9.0
111	107-82-4	Butane, 1-bromo-3-methyl-		151	1.68	3.07	9.20
112	78-78-4	Butane, 2-methyl-		72	1.32	2.72	7.73
113	563-45-1	1-Butene, 3-methyl-		70	1.19	2.59	7.60
114	78-76-2	Butane, 2-bromo-		137	1.18	2.58	7.73
115	109-68-2	2-Pentene		70	1.18	2.58	8.72

Table4 カテゴリー該当物質(未点検既存化学物質(30 物質)) [続き]

No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (予測値) [-]	logKow ^{*3} (計算値) [-]	Dmax ^{*4} [Å]
116	2004-70-8	1,3-Pentadiene, (3E)-		68	1.04	2.45	8.71

117	590-19-2	1,2-Butadiene		54	0.64	2.06	7.35

2. 様々な理由で解析に使用しなかった物質:

当カテゴリー定義に該当するが、試験条件等の理由で解析に使用しなかった化審法既存化学物質を示す(Table5)。

Table5 解析に使用しなかった化審法既存化学物質(18 物質)とその除外理由

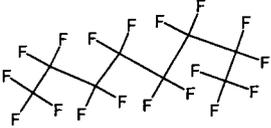
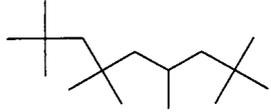
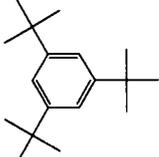
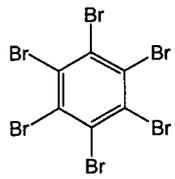
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow*1 (計算値) [-]	除外理由
118	544-76-3	n-ヘキサデカン	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{CH}_3$	226	1.36	8.20	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
119	307-34-6	ペルフルオロオクタン		438	3.93	7.95	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
120	4390-04-9	2, 2, 4, 4, 6, 8, 8-ヘプタメチルノナン		226	2.08	7.79	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
121	1460-02-2	1, 3, 5-トリ-tert-ブチルベンゼン		246	4.42	7.72	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
122	629-62-9	n-ペンタデカン	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{13}\text{CH}_3$	212	1.49	7.71	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
123	-	塩素化パラフィン	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{12}\text{CH}_2\text{Cl}$	233	2.56	7.47	・対水溶解度の値が明確に測定されていない ・混合物で測定されている
124	87-82-1	ヘキサブロモベンゼン		552	0.75	7.33	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある

Table5 解析に使用しなかった化審法既存化学物質(18物質)とその除外理由[続き]

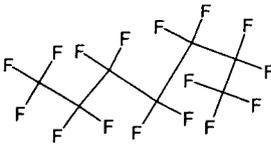
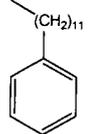
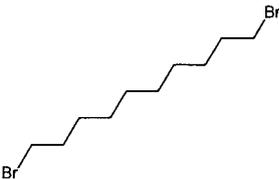
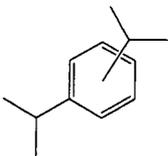
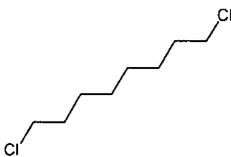
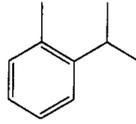
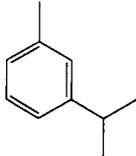
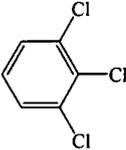
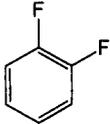
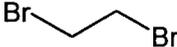
No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow*1 (計算値) [-]	除外理由
125	335-57-9	ペルフルオロヘプタン		388	3.74	6.99	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
126	87-83-2	ペンタブロモトルエン		487	1.47	6.99	・試験濃度が対水溶解度よりも大きいため、BCF値が正確に測定されていない可能性がある
127	123-01-3	アルキル(C=6~18)ベンゼン(分枝型)		204	2.10	6.40	・混合物で測定されている
128	4101-68-2	1,10-ジブロムデカン		300	1.59	5.94	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
129	25321-09-9	ジイソプロピルベンゼン		162	3.15	4.90	・混合物で測定されている
130	2162-99-4	1,8-ジクロロオクタ		183	2.45	4.78	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
131	527-84-4	o-シメン		134	-	4.00	・m-シメン【難分解・低濃縮性】の結果から類推されているため、濃縮度試験が行われていない
132	535-77-3	m-シメン		134	2.69	4.00	・対水溶解度の値が明確に測定されていない

Table5 解析に使用しなかった化審法既存化学物質(18物質)とその除外理由[続き]

No.	CAS No.	物質名	分子構造	分子量	logBCF (実測値) [-]	logKow ⁰¹ (計算値) [-]	除外理由
133	87-61-6	1,2,3-トリクロロベンゼン		181	2.61	3.93	・対水溶解度の値が明確に測定されていない
134	367-11-3	1,2-ジフルオロベンゼン		114	-	2.39	・分配係数の値から類推されているため、濃縮度試験が行われていない
135	106-93-4	1,2-ジブロムエタン		188	0.35	2.01	・対水溶解度の値が明確に測定されていない

3. 補足データ:

logKow と logBCF の相関が弱くなる傾向にある logKow \geq 6 の物質(Table3)、分子サイズが大きく、生体膜透過における拡散速度が遅くなる傾向にある物質(Table3)の logKow vs. logBCF プロットを Fig.1,2 に示す。

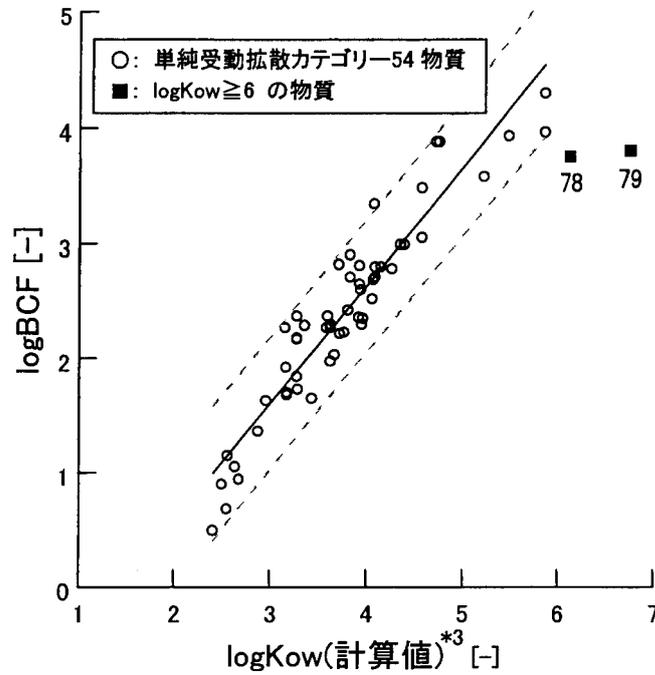


Fig.1 単純受動拡散カテゴリ該当物質と脂肪族、芳香族炭化水素およびハロゲン化物かつ logKow \geq 6 の物質の logKow vs. logBCF プロット

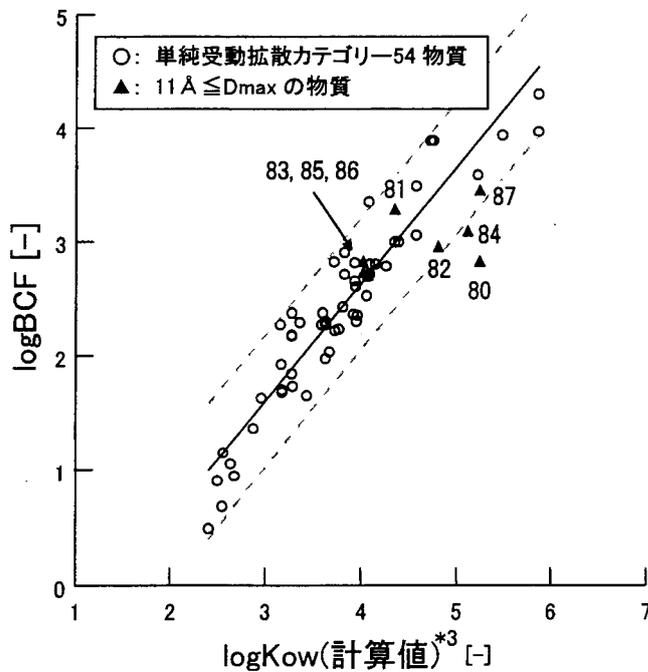


Fig.2 単純受動拡散カテゴリ該当物質と脂肪族、芳香族炭化水素およびハロゲン化物かつ Dmax^{*4} \geq 11 Å の物質の logKow vs. logBCF プロット

用語集：

【BCFWIN ver.2.15】

アメリカの EPA で使用されているモデル。予測対象物質をイオン性と非イオン性に分類し、 $\log K_{ow}$ - $\log BCF$ の相関式から BCF を予測する。 $\log K_{ow}$ の算出には KOWWIN を使用する。

【CERI モデル ver.2.18】

(財)化学物評価研究機構によって開発されたモデル。予測対象物質を分子構造によって予測困難物質、定性予測を行う物質、 $\log K_{ow}$ - $\log BCF$ の相関式を用いて予測する物質に分類し、BCF の予測を行う。 $\log K_{ow}$ の算出には ClogP を使用する。

【Baseline Model ver.5.100】

ブルガリアにある Prof. Assen Zlatarov 大学の Dimitrov らによって提唱されたモデル。このモデルでは、 $\log K_{ow}$ で表される受動拡散の式から $\log BCF_{max}$ を算出し、この値から物質の代謝性、分子サイズ、解離性などで表される Mitigation Factor を引くことによって BCF の予測を行う。物質の代謝性は、論文等で公表されている Rat の代謝情報をデータベース化したシミュレータより求める。分子サイズは、自動生成されるいくつかの分子配座を初期構造とし、半経験的量子化学計算を用いて計算される最安定構造から算出する。量子化学計算には mopac、 $\log K_{ow}$ の算出には KOWWIN を使用する。

カテゴリーアプローチによる評価報告書の例(1)

資料3-別添2

区分	対象物質	該当カテゴリー: 単純受動拡散カテゴリー		総合評価: $\log BCF = 2.16 \pm 0.24$ (Read-across) (相関式の95%信頼区間(0.53)より、Read-acrossの95%信頼区間(0.24)の方が幅が狭く、信頼性が高いため、Read-acrossによる予測結果を採用する。)
化学物質名	クロロベンゾトリフルオライド	相関式による予測: $\log BCF = 2.00 \pm 0.53$ $\cdot \log BCF = 1.05 \log Kow - 1.71 = 1.05 \times 3.53 - 1.71 = 2.00$ $\cdot (95\% \text{信頼区間}) = t \times \sqrt{Ve} \times \sqrt{1 + 1/n + (x - x_{ave})^2 / S_{xx}} = 0.53$		
CAS	88-16-4	n (トレーニングセットのデータ数): 48 Ve (相関式の誤差分散): 0.067 x (対象物質の $\log Pow$): 3.53 x_{ave} (トレーニングセットの $\log Pow$ の平均値): 3.83 S_{xx} ($\log Pow$ の標準偏差の平方和): 26.62 t 分布表(両側, $\alpha=0.05$, 自由度46)より $t=2.013$		
構造式		Read-acrossによる予測: $\log BCF = 2.16 \pm 0.24$ ・類似物質の選択条件 基本骨格: ベンゼン2置換体 置換基: ハロゲンまたはトリフルオロメチル基 $\log Pow$: 3.53(対象物質の $\log Pow$) ± 0.5 $\cdot \log BCF = (\text{類似物質1-5の} \log BCF \text{の平均値}) = 2.16$ $\cdot (95\% \text{信頼区間}) = S.E. \times t = 0.24$		
物理化学的性状	分子量	180.5	$S.E.$ (類似物質1-5の $\log BCF$ の標準誤差) = 0.09 t 分布表(両側, $\alpha=0.05$, 自由度4)より $t=2.776$	
	沸点[°C]	-		
	融点[°C]	-		
	対水溶解度 [mg/l]	-		
	$D_{max} \times 1$ [Å]	8.5		
	n-オクタノール/水分配係数($\log Pow$)	3.53(実測値) 3.60(計算値*2)		

区分	類似物質1	類似物質2	類似物質3	類似物質4	類似物質5
化学物質名	o-ジクロロベンゼン	m-ジクロロベンゼン	p-ジクロロベンゼン	p-ジブロモベンゼン	メタキシレン ヘキサフルオライド
CAS	95-50-1	541-73-1	106-46-7	106-37-6	402-31-3
構造式					
物理化学的性状	分子量	147.0	147.0	147.0	235.9
	沸点[°C]	180.0	173.0	174.0	220.0
	融点[°C]	-16.7	-24.8	52.1	87.3
	対水溶解度 [mg/l]	100	75	49	12
	$D_{max} \times 1$ [Å]	8.3	8.7	9.5	10.1
	n-オクタノール/水分配係数($\log Pow$)	3.66(実測値) 3.28(計算値*2)	3.63(実測値) 3.28(計算値*2)	3.41(実測値) 3.28(計算値*2)	3.85(実測値) 3.77(計算値*2)
濃縮度試験結果($\log BCF \times 3$)	2.18	2.17	1.84	2.23	2.36

*1 化学物質の安定構造における最大直径
 *2 KOWWIN ver.1.67により算出
 *3 $\log BCF$ の後半6点の平均値

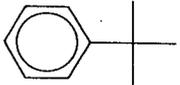
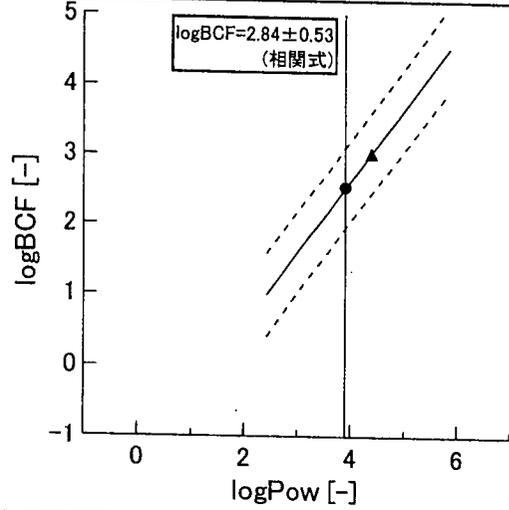
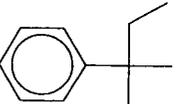
カテゴリーアプローチによる評価報告書の例(2)

区分		対象物質	該当カテゴリー：単純受動拡散カテゴリー 相関式による予測: $\log BCF = 2.65 \pm 0.57$ ・ $\log BCF = 1.03 \log Pow(\text{実測値}) - 1.48 = 1.03 \times 4.01 - 1.48 = 2.65$ ・(95%信頼区間) = $t \times \sqrt{Ve \times \sqrt{1 + 1/n + (x - x_{ave})^2 / S_{xx}}} = 0.57$ (n(トレーニングセットのデータ数): 54 Ve(相関式の誤差分散): 0.080 x(対象物質のlogPow): 4.01 x_{ave} (トレーニングセットのlogPowの平均値): 3.77 S_{xx} (logPowの標準偏差の平方和): 32.02 t分布表(両側, $\alpha=0.05$, 自由度52)より $t=2.007$)		総合評価: $\log BCF = 2.65 \pm 0.37$ (相関式) (Read-acrossの95%信頼区間(6.80)より、相関式の95%信頼区間(0.57)の方が幅が狭く、信頼性が高いため、相関式による予測結果を採用する。)	
化学物質名		ジメチルシクロヘキサ				
CAS		583-57-3	Read-acrossによる予測: $\log BCF = 2.81 \pm 6.80$ ・類似物質の選択条件 基本骨格: メチルシクロアルカン 置換基: ハロゲンまたは炭化水素 $\log Pow$: 4.01 (対象物質のlogPow) ± 0.5 ・ $\log BCF = (\text{類似物質1-2のlogBCFの平均値}) = 2.81$ ・(95%信頼区間) = $S.E. \times t = 6.80$ (S.E.(類似物質1-2のlogBCFの標準誤差) = 0.535 t分布表(両側, $\alpha=0.05$, 自由度1)より $t=12.706$)			
構造式		<chem>CC1CCCCC1C</chem>				
物理化学的性状	分子量	112.2				
	沸点[°C]	129.8				
	融点[°C]	-49.8				
	対水溶解度 [mg/l]	6.0				
	Dmax*1 [Å]	8.2				
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	4.01(計算値*2)				

区分		類似物質1	類似物質2			
化学物質名		メチルシクロヘキサ	エチルシクロヘキサ			
CAS		108-87-2	1678-91-7			
CAS		<chem>CC1CCCCC1</chem>	<chem>CC1CCCCC1CC</chem>			
物理化学的性状	分子量	98.2	112.2			
	沸点[°C]	100.9	131.9			
	融点[°C]	-	-			
	対水溶解度 [mg/l]	-	-			
	Dmax*1 [Å]	8.1	9.6			
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	3.87(実測値) 3.59(計算値*2)	4.79(実測値) 4.08(計算値*2)			
濃縮度試験結果(logBCF*3)		2.27	3.34			

*1 化学物質の安定構造における最大直径
 *2 KOWWIN ver.1.67により算出
 *3 logBCFの後半6点の平均値

カテゴリーアプローチによる評価報告書の例(3)

区分		対象物質	該当カテゴリー: 単純受動拡散カテゴリー			
化学物質名		tert-ブチルベンゼン	相関式による予測: $\log BCF = 2.84 \pm 0.53$ ・ $\log BCF = 1.05 \log Pow(\text{実測値}) - 1.71 = 1.05 \times 3.53 - 1.71 = 2.00$ ・(95%信頼区間) $= t \times \sqrt{Ve} \times \sqrt{1 + 1/n + (x - x_{ave})^2 / S_{xx}} = 0.53$			
CAS		98-06-6	$\left(\begin{array}{l} n(\text{トレーニングセットのデータ数}): 48 \\ Ve(\text{相関式の誤差分散}): 0.067 \\ x(\text{対象物質の} \log Pow): 4.11 \\ x_{ave}(\text{トレーニングセットの} \log Pow \text{の平均値}): 3.83 \\ S_{xx}(\log Pow \text{の標準偏差の平方和}): 26.62 \\ t \text{分布表(両側, } \alpha=0.05, \text{自由度} 46) \text{より } t=2.013 \end{array} \right)$			
構造式						
物理化学的性状	分子量	134.2	Read-acrossによる予測: 予測不能(類次物質が1物質のため) ・類似物質の選択条件 基本骨格: tert-ブチルベンゼン 置換基: ハロゲンまたは炭化水素 $\log Pow: 4.11(\text{対象物質の} \log Pow) \pm 0.5$			
	沸点[°C]	168.5				
	融点[°C]	-58.1				
	対水溶解度 [mg/l]	29.5				
	Dmax*1 [Å]	9.4				
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	4.11(実測値) 3.90(計算値)				
総合評価: $\log BCF = 2.84 \pm 0.53$ (相関式) (Read-acrossは予測不能のため、相関式による予測結果を採用する。)						
区分		類似物質1				
化学物質名		tert-アミルベンゼン [tert-ペンチルベンゼン]				
CAS		2049-95-8				
構造式						
物理化学的性状	分子量	148.2				
	沸点[°C]	192.4				
	融点[°C]	-				
	対水溶解度 [mg/l]	-				
	Dmax*1 [Å]	9.4				
	n-オクタノール/水分配係数(logPow)	- 4.39(計算値*2)				
濃縮度試験結果(logBCF*3)		2.99				

*1 化学物質の安定構造における最大直径

*2 KOWWIN ver.1.67[により算出

*3 logBCFの後半6点の平均値

薬事・食品衛生審議会薬事分科会
化学物質安全対策部会化学物質調査会
委員名簿

	氏名	所属
1	江馬 眞 (座長)	(独) 産業技術総合研究所安全科学研究部門招聘研究員
2	清水 英佑	中央労働災害防止協会労働衛生調査分析センター所長
3	高木 篤也	国立医薬品食品衛生研究所毒性部第三室長
4	田中 博之	(独) 水産総合研究センター瀬戸内海区水産研究所生態化学研究室長
5	長尾 哲二	近畿大学理工学部生命科学科教授
6	西川 秋佳	国立医薬品食品衛生研究所病理部長
7	西原 力	国立大学法人大阪大学名誉教授及び兵庫医療大学薬学部教授
8	能美 健彦	国立医薬品食品衛生研究所変異遺伝部長
9	平塚 明	東京薬科大学薬物代謝安全性学教室教授
10	前川 昭彦	(独) 製品評価技術基盤機構技術顧問
11	吉岡 義正	国立大学法人大分大学教授

化学物質審議会
審査部会
委員名簿

	氏名	所属
1	内田 直行	日本大学教授
2	北野 大 (部会長)	明治大学工学部応用化学科教授
3	竹内 和彦	(独) 産業技術総合研究所環境化学技術研究部門総括研究員
4	竹下 達也	和歌山県立医科大学教授
5	田中 明人	兵庫医療大学薬学部教授
6	西原 力	国立大学法人大阪大学名誉教授及び兵庫医療大学薬学部教授
7	林 真	(独) 製品評価技術基盤機構技術顧問
8	前川 昭彦	(独) 製品評価技術基盤機構技術顧問
9	吉田 緑	国立医薬品食品衛生研究所安全性生物試験研究センター病理部室長
10	米澤 義堯	(独) 産業技術総合研究所 化学物質リスク管理研究センター

中央環境審議会環境保健部会
化学物質審査小委員会
委員名簿

	氏 名	所 属
臨時委員 (委員長)	中杉 修身	元上智大学教授
臨時委員	菅野 純	国立医薬品食品衛生研究所毒性部長
臨時委員	白石 寛明	(独) 国立環境研究所環境リスク研究センター長
臨時委員	花里 孝幸	国立大学法人信州大学山岳科学総合研究所山地水域環境保全学部門長
臨時委員	吉岡 義正	国立大学法人大分大学教授
専門委員	青木 康展	(独) 国立環境研究所環境リスク研究センター健康リスク評価研究室長
専門委員	日下 幸則	国立大学法人福井大学教授
専門委員	田中 嘉成	(独) 国立環境研究所環境リスク研究センター生態リスク評価研究室長
専門委員	田辺 信介	国立大学法人愛媛大学教授
専門委員	和田 勝	国立大学法人東京医科歯科大学教授

監視化学物質への該当性の判定等に係る試験方法及び判定基準

最終改正 平成18年7月21日

厚生労働省医薬食品局審査管理課化学物質安全対策室
経済産業省製造産業局化学物質管理課化学物質安全室
環境省総合環境政策局環境保健部企画課化学物質審査室

化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に基づく化学物質の審査に係る厚生労働省、経済産業省及び環境省の関係審議会を合同で開催するに当たり、第一種監視化学物質、第二種監視化学物質及び第三種監視化学物質への該当性の判定を行うために必要とされる試験の試験成績に係る現在の判定基準等について、下記のとおりとする。

下記の基準を基本としつつ、関係審議会における専門的知見に基づく意見を踏まえ、各監視化学物質への該当性の判定を行うこととする。

記

I. 試験方法

- (1) 新規化学物質及び既存化学物質が監視化学物質に該当するかどうかの判断は、当該新規化学物質及び既存化学物質について既に得られている知見の他、「新規化学物質に係る試験並びに第一種監視化学物質及び第二種監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令」第2条第1項から第3項まで及び第2条の2の規定による以下の試験の試験成績に基づき行うものとされている。
- ①微生物等による化学物質の分解度試験（分解度試験）
 - ②魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験（濃縮度試験）又は1-オクタノールと水との間の分配係数測定試験（Pow 測定試験）
 - ③ほ乳類を用いる28日間の反復投与毒性試験（28日間反復投与毒性試験）又はほ乳類を用いる90日間の反復投与毒性試験（90日間反復投与毒性試験）
 - ④細菌を用いる復帰突然変異試験及びほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験又はマウスリンフォーマ TK 試験（変異原性試験）
（以下、③及び④を「スクリーニング毒性に関する試験」という。）
 - ⑤藻類生長阻害試験、ミジンコ急性遊泳阻害試験及び魚類急性毒性試験（生態毒性試験）
- (2) これらの試験は、原則として「新規化学物質等に係る試験の方法について（平成15年11月21日薬食発第1121002号・平成15・11・13製局第2号・環企発第031121002号）」（以下「通知」という。）に沿って実施することとされているが、通知に定められていない試験方法（OECDテストガイドライン等）に基づく試験成績については、上記(1)の試験方法と同等の取扱いが可能である

と考えられ当該試験成績の信頼性が確保されていると認められる場合には、判定の際に用いることとしている。

II. 試験成績に係る判定基準

上記 I. (1) に掲げる試験の試験成績に基づき判定を行う場合には、原則として以下の基準によることとしている。

(1) 分解度試験

① 良分解性

- ・ 3つの試験容器のうち2つ以上でBODによる分解度が60%以上であり、かつ3つの平均が60%以上であること。
- ・ あわせて HPLC、GC 等の直接分析法により分解生成物が生成していないことが確認されること。
- ・ なお、通知で定められた試験方法による試験成績が上記の基準を満たさない場合であって、BOD 曲線等から試験終了後も引き続き生分解していることが示唆される場合（上昇傾向等）には、OECDテストガイドライン 302Cによる試験成績に基づいて判定を行うことができる。

② 難分解性

- ・ 良分解性でないこと。

(2) 濃縮度試験又は Pow 測定試験

① 高濃縮性

- ・ 濃縮倍率が5000倍以上であること。

② 高濃縮性でない

以下のいずれかであること。

- ・ 濃縮倍率が1000倍未満であること
- ・ 1-オクタノール/水分配係数 (Pow) の対数が3.5未満であること。ただし、界面活性のある物質、分子量分布を有する混合物、有機金属化合物、純度の低い物質 (HPLC 法を除く) 及び無機化合物には適用しない。

③ 濃縮倍率が1000倍以上、5000倍未満の場合には、必要に応じ、以下の成績を考慮して高濃縮性かどうかを総合的に判断する。

- ・ 排泄試験
- ・ 部位別 (可食部) の濃縮倍率

なお、上記の判定に当たっては、原則として、定常状態における濃縮倍率を用いることとし、定常状態での数値が得られない場合には、総合的に判断をする。また、濃縮倍率に濃度依存性が認められる場合には、必要に応じてより低濃度区での試験を行い、その成績を踏まえ判断する。

(3) スクリーニング毒性に関する試験

① 細菌を用いる復帰突然変異試験

a)陽性

- ・いずれかの試験系で溶媒対照の2倍を超えて復帰変異誘発コロニー数が増加し、その作用に再現性又は用量依存性が認められること。
- ・比活性値が概ね1000rev/mg以上である場合には、原則として、強い陽性と判断する。
- ・陽性の場合にあって、再現性や用量依存性に乏しい場合等には、原則として、軽微な陽性と判断する。

b)陰性

- ・陽性でないこと。

②ほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験又はマウスリンフォーマ TK 試験

a) ほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験

[1] 陽性

- ・染色体異常を持つ細胞の出現率が陰性対照に比べ概ね10%以上であり、その作用に再現性又は用量依存性が認められること。
- ・ D_{20} 値が 10^{-2} mg/ml以下である場合には、原則として、強い陽性と判断する。
- ・陽性の場合にあって、再現性や用量依存性に乏しい場合等、又は概ね50%あるいはそれ以上の細胞増殖阻害が起こる濃度でのみの陽性反応等は、原則として、軽微な陽性と判断する。

[2] 陰性

- ・陽性でないこと。

b) マウスリンフォーマ TK 試験

[1] 陽性

- ・いずれかの試験系で突然変異頻度が統計学的に有意な増加を示し、その作用に再現性又は用量依存性が認められること。
- ・いずれかの試験系で突然変異頻度が陰性対照の4倍、又は陰性対照より 400×10^{-6} を超えて増加している場合には、原則として、強い陽性と判断する。
- ・陽性の場合にあって、再現性や用量依存性に乏しい場合、若しくは突然変異頻度が陰性対照の2倍未満である場合等、又は概ね80%あるいはそれ以上の細胞毒性が認められる濃度でのみの陽性反応等は、原則として、軽微な陽性と判断する。

[2] 陰性

- ・陽性でないこと。

③28日間反復投与毒性試験（以下、OECD テストガイドライン422で定められた方法に準じて実施された試験を含む。）又は90日間反復投与毒性試験

a)NOEL 及び発現した毒性の程度から以下の3段階に分類する。

- [1] : ・NOEL が概ね25mg/kg/day 未満のもの（NOEL の推定根拠において非特異的な変化等、毒性学的に軽微な変化のみが発現した場合を除く。）
- ・NOEL が概ね25mg/kg/day 以上250mg/kg/day 未満のものであって、NOEL の推定根拠又はその他の発現した毒性において、神経行動毒性や重篤な病理組織学的な変化等、毒性学的に重要な変化（回復期の影

響については、b) A又はBに該当するものとする。)が発現したものの。

[2] : NOELが概ね250mg/kg/day未満のもの([1]に該当するものを除く。)

[3] : NOELが概ね250mg/kg/day以上のもの。

なお、90日間反復投与毒性試験においては、28日間反復投与毒性試験に比べて投与期間が長いこと等を考慮しつつ、判断することとする。

b)回復試験中に見られる影響の程度から以下の3段階に分類する。なお、分類に当たっては、可逆性の程度、回復期における毒性の残存状況、遅発毒性の有無、組織学的変化に起因する生化学的な変化かどうか等を考慮する。

A : 回復試験期間内に回復しない病理組織学的な変化を生じさせるもの、又は遅発毒性を生じさせるもの

B : 回復試験期間内に回復しない生化学的な変化を生じさせるもの

C : 回復試験の期間において回復する、又は回復途上であることが示される可逆的変化

(4) 生態毒性試験

藻類生長阻害試験、ミジンコ急性遊泳阻害試験及び魚類急性毒性試験の結果から以下の3段階に分類する。(藻類生長阻害試験に基づく毒性値は、原則として速度法により算出したものを用いる。以下同じ。)

[1] : 3種の試験結果から得られるL(E)C50値の最小値が概ね1mg/l以下のもの。

[2] : 3種の試験結果から得られるL(E)C50値のいずれかが概ね1mg/l超、10mg/l以下のもの。([1]に該当する場合を除く。)

[3] : 3種の試験結果から得られるL(E)C50値の最小値が概ね10mg/l超のもの。

(5) 第一種監視化学物質の判定

既存化学物質について、(1)が難分解性であり、(2)が高濃縮性であると判断された場合であって、人及び高次捕食動物への長期毒性を有することがいずれも明らかでない場合には第一種監視化学物質として判定する。

(6) 第二種監視化学物質の判定

(1)が難分解性であり、(2)が高濃縮性ではないと判断された場合であって、(3)の結果、次のいずれかに該当する場合には第二種監視化学物質として判定する。

①28日間反復投与毒性試験又は90日間反復投与毒性試験(以下「反復投与毒性試験等」という。)において強い毒性が示唆されるもの

((3) ③ [1] に該当する場合)

②変異原性試験において強い陽性が示唆されるもの

((3) ①又は②が強い陽性の場合)

③反復投与毒性試験等において中程度の毒性を示すとともに、変異原性試験で強い陽性ではないものの陽性であるもの

((3) ③ [2] に分類され、かつ、(3) ①又は②が陽性(但し、軽微な陽性

である場合を除く。)の場合)

ただし、通知に規定する慢性毒性試験、生殖能及び後世代に及ぼす影響に関する試験、催奇形性試験、変異原性試験(小核試験等)、がん原性試験、生体内運命に関する試験、薬理学的試験又はこれらと試験の目的が合致している試験において、死亡、がん、長期にわたる障害、生殖能又は後世代の発生に及ぼす影響その他これらに準じて毒性学的に重要な影響が認められた知見がある場合には、必要に応じ、これらの試験成績を考慮して第二種監視化学物質に該当するか判定する。

(7) 第三種監視化学物質の判定

(1)が難分解性であり、第一種特定化学物質ではないと判断された場合、以下の[1]、[2]のいずれかにより第三種監視化学物質に該当する場合には、第三種監視化学物質として判定する。

[1] (4)の結果から以下のように判定する。

①3種の試験結果から得られるL(E)C50値の最小値が概ね1mg/l以下である場合((4)[1]に該当する場合)には、第三種監視化学物質として判定する。

②3種の試験結果から得られるL(E)C50値のいずれかが概ね1mg/l超、10mg/l以下である場合((4)[2]に該当する場合)には、以下のとおり判断する。なお、下記a)～c)に複数該当する場合であって、第三種監視化学物質に該当するかの判定が分かれた場合においては、第三種監視化学物質として判定する。

a)魚類急性毒性試験の結果が該当する場合には、第三種監視化学物質として判定する。

b)ミジンコ急性遊泳阻害試験の結果が該当する場合には、物質の化学構造等を考慮して個別に判断する。

c)藻類生長阻害試験の結果が該当する場合には、以下のように判定する。

(i)EC50の値が1mg/l超、2mg/l以下である場合には、第三種監視化学物質として判定する。

(ii)EC50の値が2mg/l超、10mg/l以下である場合には、第三種監視化学物質として判定しない。

③3種の試験結果から得られるL(E)C50値の最小値が概ね10mg/l超である場合((4)[3]に該当する場合)には、第三種監視化学物質とは判定しない。

[2]「第三種監視化学物質に係る有害性調査のための試験の方法について(平成16年3月25日平成16・3・19製局第6号・環保企発第040325004号)」に定める藻類生長阻害試験、ミジンコ繁殖試験又は魚類初期生活段階毒性試験の試験結果において、少なくとも、NOECが0.1mg/l以下となる場合には第三種監視化学物質として判定する。また、これらの試験以外の水生生物に対する慢性毒性を示唆する試験結果が得られた場合には、個別に判断する。

なお、上記に基づき判定が困難な物質については、類似の物質の評価及び判定の例を参考にしつつ、安全側に立脚した観点から判定する。

Ⅲ. 高分子フロースキームに基づく判定

高分子フロースキームに基づき判定を行う場合には、原則として以下の基準によることとしている。

(1) 以下の安定性試験の結果及び溶解性試験の結果に係る基準を満たす場合には、難分解性であり、かつ、高濃縮性ではないと判定する。

①安定性試験

・重量変化の基準

：試験前後で変化がないこと（2%以下の変化は変化とは見なさない）。

・DOC 変化の基準

：試験前後で変化がないこと（5ppm 以下の変化は変化とは見なさない）。

・I Rスペクトルの基準

：試験前後で変化がないこと。

・分子量変化の基準

：試験前後で変化がないこと。

②溶解性試験

a) 以下の9種類の溶媒のいずれにも溶けない場合であって、特定の構造特性（架橋構造、高結晶性等）を有するか、又は酸・アルカリに不溶であること。

水、n-オクタン、n-ヘプタン、トルエン、1,2-ジクロロエタン、イソプロピルアルコール、テトラヒドフラン(THF)、メチル tert-ブチルエーテル(MIBK)、ジメチルホルムアミド(DMF)

b) 上記 a) 以外の場合は、分子量 1000 未満の成分含有量が 1% 以下であること。

なお、上記①及び②の基準を満たさない場合には、分解性試験、濃縮度試験、スクリーニング毒性に関する試験、生態毒性試験の試験成績に基づき判定を行う。

(2) Ⅲ. (1) ①及び②の基準を満たす場合には、以下のとおり判定を行う。

a) 重金属を含まず、化学構造と長期毒性との関連性に関する知見等から判断して人への長期毒性を有することが示唆されない場合には、第二種監視化学物質に該当しないと判定する。

b) a) 以外の場合には、スクリーニング毒性に関する試験の試験成績に基づき第二種監視化学物質への該当性の判定を行う。

c) 以下のいずれかの場合には、第三種監視化学物質に該当しないと判定する。

(i) 重金属を含まず、水、酸及びアルカリに対する溶解性が確認されない場合であって、次のいずれかに該当する場合

・水への自己分散性*が確認されない場合

・水への自己分散性が確認された場合であって、カチオン性を示さない場合

* 分散剤を含まない条件下で分散する性状を有するもの

(ii) 重金属を含まず、水、酸及びアルカリに対する溶解性が確認された場合にカチオン性を示さないものであって、化学構造と動植物への毒性との関連性に関する知見等から判断して、動植物の生息又は生育に支障を及ぼすおそれを有すると示唆されない場合

d)c)以外の場合には、生態毒性試験の試験成績に基づき第三種監視化学物質への該当性の判定を行う。

「監視化学物質（指定化学物質）への該当性の判定等に係る試験方法及び判定基準」の改正履歴

制定：平成15年4月18日

改正：平成16年4月30日（指定化学物質から監視化学物質への名称変更、生態毒性試験の追加、第一種監視化学物質及び第三種監視化学物質の判定基準の追加）

改正：平成16年6月18日（Pow測定試験における判定基準を3.0未満から3.5未満に変更及びPow測定試験における除外規定を追加）

改正：平成17年1月14日（高分子フロースキームに基づく第三種監視化学物質判定基準において水への自己分散性が確認された場合の基準を追加及びPow測定試験にHPLC法を採用したことに伴う変更を追記）

改正：平成17年6月24日（マウスリンフォーマTK試験、90日間反復投与毒性試験及び慢性毒性試験等の記載を追加）

改正：平成17年9月30日（第三種監視化学物質において3種生物における生態毒性試験の判定基準及び水生生物に対する慢性毒性における判定基準等の記載を追記）

改正：平成18年7月21日（第三種監視化学物質判定基準中の藻類生長阻害試験に関し、毒性値の計算に原則として速度法を用いることを追記及び判定基準を変更）

水溶性ポリマーの生態毒性について

米国TSCA (Toxic Substances Control Act) では、製造前届出 (PMN) を免除するポリマーの要件を定めているが、このポリマー免除の設定基準については「Ecological Assessment of POLYMER (Strategies for Product Stewardship and Regulatory Program)」(1997)において示されているところである。

この中で、水溶性ポリマーの生態毒性については、ポリマーの持つ電荷によって評価を行うことが可能であるとされ、以下のとおり整理されている。

電荷の種類	生態毒性 (一般論)	備 考
カチオン性	高い	<u>米国 TSCA では免除対象から除外されている。</u>
アニオン性	中程度	<ul style="list-style-type: none"> • <u>Poly(aromatic acids) (スルホン酸、カルボン酸によるもの) の多くは、水生生物に中程度の毒性を示し、その作用機作は不明。</u> • Poly(aliphatic acids)は藻類にのみ中程度の毒性を示すが、その作用は水中の必須金属をキレートすることによるものであり、カルシウムイオンの濃度を上げることなどで毒性を打ち消すことができる。
非イオン性	低い	<u>非イオン性ポリマーは一般には毒性は弱い、界面活性作用のあるものは水生生物に有毒。</u>
両性イオン性	カチオン・アニオン比率による	<u>両性イオン性ポリマーの毒性は、正電荷密度とカチオン・アニオン比率による。</u>

特定化学物質及び監視化学物質の要件及び評価のための試験項目について

	要 件 ※ () 内は法律上の規定	評価のための試験項目
第一種特定化学物質 (注) 人及び高次捕食動物への長期毒性を有することがいずれも明らかでない場合には第一種監視化学物質として判定される。	難分解性である (自然的作用による化学的変化を生じにくいもの)	微生物等による化学物質の分解度試験
	高濃縮性である (生物の体内に蓄積されやすいもの)	魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験 又は 1-オクタノールと水との間の分配係数測定試験
	人への長期毒性を有する (継続的に摂取される場合には、人の健康を損なうおそれがあるもの) 又は 高次捕食動物への長期毒性を有する (継続的に摂取される場合には、高次捕食動物の生息又は生育に支障を及ぼすおそれがあるもの)	化学物質の慢性毒性試験、生殖能及び後世代に及ぼす影響に関する試験、催奇形性試験、変異原性試験、がん原性試験、生体内運命に関する試験及び薬理学的試験 ほ乳類の生殖能及び後世代に及ぼす影響に関する試験並びに鳥類の繁殖に及ぼす影響に関する試験
第一種監視化学物質	難分解性である (自然的作用による化学的変化を生じにくいもの)	微生物等による化学物質の分解度試験
	高濃縮性である (生物の体内に蓄積されやすいもの)	魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験 又は 1-オクタノールと水との間の分配係数測定試験
	人への長期毒性を有するか不明 (継続的に摂取される場合には、人の健康を損なうおそれがあるかどうか明らかでない) かつ 高次捕食動物への長期毒性を有するか不明 (継続的に摂取される場合には、高次捕食動物の生息又は生育に支障を及ぼすおそれがあるかどうか明らかでない)	/
第二種監視化学物質 o r 第三種監視化学物質	難分解性である (自然的作用による化学的変化を生じにくいもの)	微生物等による化学物質の分解度試験
	高濃縮性ではない* (生物の体内に蓄積されにくいもの)	魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験 又は 1-オクタノールと水との間の分配係数測定試験
	人への長期毒性の疑いを有する (第二種監視化学物質) (継続的に摂取される場合には、人の健康を損なうおそれがあるものに該当する疑いがあるもの) 生態毒性を有する (第三種監視化学物質) (動植物の生息又は生育に支障を及ぼすおそれがあるもの)	ほ乳類を用いる28日間の反復投与毒性試験並びに細菌を用いる復帰突然変異試験及びほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験による変異原性試験 藻類生長阻害試験、ミジンコ急性遊泳阻害試験及び魚類急性毒性試験

* 「難分解性」、「高濃縮性」及び「生態毒性あり」(高次捕食動物への毒性なし)の化学物質も第三種監視化学物質に該当することもあり得る。

平成21年12月3省合同審議会

既存化学物質審査物質
(人健康影響・生態影響)
に係る分解性・蓄積性データ



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	4-96
既存名簿 官報公示名称	ポリ(ジヘテトラ)クロロ-4, 4'-ジアミノジフェニルメタン		

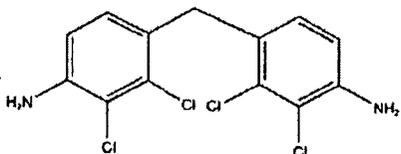
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性 濃縮性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
2, 2', 3, 3'-テトラクロロ-4, 4'-ジアミノジフェニルメタン	昭和52年11月30日	分解性が良好でないと判断される物質
2, 2', 3, 3'-テトラクロロ-4, 4'-ジアミノジフェニルメタン	昭和52年11月30日	濃縮性が中程度と判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	42240-73-3
点検対象物質名称	2, 2', 3, 3'-テトラクロロ-4, 4'-ジアミノジフェニルメタン
官報公示整理番号	官報公示名称
4-96	ポリ(ジヘテトラ)クロロ-4, 4'-ジアミノジフェニルメタン

分解性

判定	難分解性		
試験方法	標準法		
試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	2週間	100 ppm	30 ppm
間接測定	BOD		
	0%		
報告書等	報告書(39KB)		

濃縮性

判定	中濃縮性	
試験方法	濃縮度試験	
48TLm値(48 hr)	魚種	
1.95 ppm	(1.95) mg/L ヒメダカ	
試験装置	試験期間	魚種
標準	8週間	コイ
濃度設定	濃縮倍率	
第1濃度区	50 ppb	690~1920
第2濃度区	5 ppb	490~4920
報告書等	濃縮度試験報告書(101KB)	

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。

該当データがありません

生態影響試験結果 データの説明

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。



[検索](#) > [化審法化学物質検索](#) > [化審法化学物質検索結果](#) > [化審法関連情報](#)

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-139
既存名簿 官報公示名称	トリアルキル (又はアルケニル, C8~24) 複合アミン		

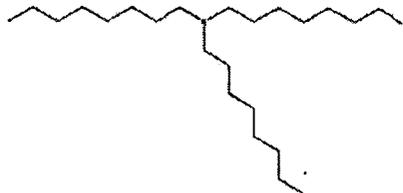
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。 それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性 濃縮性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
トリオクチルアミン	昭和58年12月28日	濃縮性がない又は低いと判断される化学物質

物質情報

構造式



CAS番号	1116-76-3
点検対象物質名称	トリ-n-オクチルアミン
官報公示整理番号	官報公示名称
2-139	トリアルキル (又はアルケニル, C8~24) 複合アミン
2-143	トリオクチルアミン

分解性

判定	難分解性
試験方法	逆転法

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	2週間	30 ppm	100 ppm

間接測定	BOD	直接測定	GC
	0%		12%

報告書等

[報告書 \(123KB\)](#)
[報告書 \(123KB\)](#)

濃縮性

判定	低濃縮性
試験方法	濃縮度試験

48TLm値 (48 hr)	魚種
5.1 ppm	ヒメダカ

試験装置	試験期間	魚種	脂質含量 (%)
標準	8週間	コイ	5.1

	濃度設定	濃縮倍率
第1濃度区	50 ppb	23~101
第2濃度区	5 ppb	(25)~143

報告書等

[濃縮度試験報告書 \(126KB\)](#)
[濃縮度試験報告書 \(126KB\)](#)

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。

該当データがありません

生態影響試験結果 データの説明

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	4-378
既存名簿 官報公示名称	ジクロロ-1,4-ナフトキノン		

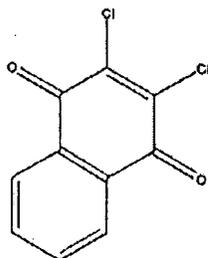
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性 濃縮性

経済産業省公表名称	経済産業省公表年月日	経済産業省公表内容
2,3-ジクロロ-1,4-ナフトキノン [官報公示整理番号: 4-378] [CAS番号: 117-80-6]	平成15年1月17日	難分解性ではあるが高濃縮性ではないと判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	117-80-6
点検対象物質名称	2,3-ジクロロ-1,4-ナフトキノン [別名: ジクロン]
官報公示整理番号	4-378
官報公示名称	ジクロロ-1,4-ナフトキノン

分解性

判定	難分解性		
試験方法	標準法		
試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	2週間	100 ppm	30 ppm
直接測定	GC		
	5%		

報告書等 [報告書 \(226KB\)](#)

濃縮性

判定	低濃縮性
試験方法	分配係数試験

n-オクタノール/水分分配係数

最小	最大	平均	試験方法
2.81	2.84	2.83	フラスコ振とう法
報告書等 分配係数試験報告書 (311KB)			

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

該当データがありません

生態影響試験結果 データの説明

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

該当データがありません



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-140
既存名簿 官報公示名称	トリメチルアミン		

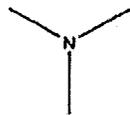
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
トリメチルアミン	昭和55年12月25日	分解性が良好と判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	75-50-3
点検対象物質名称	トリメチルアミン
官報公示整理番号	2-140
官報公示名称	トリメチルアミン

分解性

判定 試験方法	良分解性 標準法
------------	-------------

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	2週間	100 ppm	30 ppm

間接 測定	BOD(NO2)	BOD(NH3)	直接 測定	TOC	GC
	66%	92%		100%	100%

報告書等 報告書 (114KB)

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

官報公示整理番号	2-140
CAS番号	75-50-3
物質名称	トリメチルアミン
告示名称	トリメチルアミン
化審法上の規制	-

英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	-
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一代生殖毒性試験	-
その他	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されず。

分類	既存	官報公示整理番号	2-186
既存名簿 官報公示名称	テトラアルキル（C1～7）アンモニウム塩		

(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド [官報公示整理番号：2-186] [CAS番号：75-59-2]	平成14年11月8日	難分解性ではないと判断される物質

物質情報

CAS番号	75-59-2
点検対象物質名称	テトラメチルアンモニウムヒドロキシド
官報公示整理番号	官報公示名称
2-186	テトラアルキル（C1～7）アンモニウム塩

分解性

判定	良分解性			
試験方法	標準法			
試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度	
標準	2週間	100 mg/L	30 mg/L	
間接測定	BOD (NH3) 96%	直接測定	TOC 98%	HPLC 100%

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

官報公示整理番号	2-186
CAS番号	75-59-2
物質名称	テトラメチルアンモニウムヒドロキシド
告示名称	テトラアルキル（C1～7）アンモニウム塩
化審法上の規制	-
英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	- 化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	- 化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
反復・生殖併合試験(reprotox)	-
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一代生殖毒性試験	-
その他	-

生態影響試験結果 データの説明

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

該当データがありません



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-1065
既存名簿 官報公示名称	メタクリルアミド		

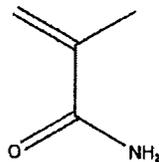
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
メタクリルアミド [官報公示整理番号: 2-1065]	平成9年12月26日	分解性が良好と判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	79-39-0
点検対象物質名称	メタクリルアミド
官報公示整理番号	官報公示名称
2-1065	メタクリルアミド

分解性

判定 試験方法	良分解性 標準法
------------	-------------

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	4週間	100 mg/L	30 mg/L

間接 測定	BOD(NH3)	直接 測定	TOC	HPLC
	21, 16, 34%		30, 22, 43%	28, 21, 43%

報告書等 報告書(424KB)

備考

・逆転条件(開放系)試験結果(4週間)は、分解度: TOC95%、HPLC100%であった。

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありませんことにご留意ください。

官報公示整理番号	2-1065
CAS番号	79-39-0
物質名称	メタクリルアミド
告示名称	メタクリルアミド
化審法上の規制	-

英文要旨	化学物質毒性データベース(国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	-
染色体異常試験	化学物質毒性データベース(国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース(国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	化学物質毒性データベース(国立医薬品食品衛生研究所)
反復・生殖併合試験(reprotox)	-
90日間試験反復経口投与 慢性毒性試験	-



[検索](#) > [化審法化学物質検索](#) > [化審法化学物質検索結果](#) > [化審法関連情報](#)

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-608
既存名簿 官報公示名称	アルカン酸 (C=4~30)		

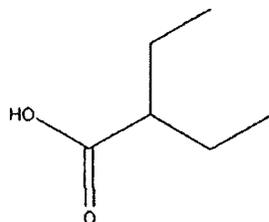
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
2-エチル酪酸 [官報公示整理番号: 2-608]	平成13年5月10日	分解性が良好と判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	88-09-5
点検対象物質名称	2-エチル酪酸
官報公示整理番号	2-608
官報公示名称	アルカン酸 (C=4~30)

分解性

判定 試験方法	良分解性 標準法			
試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度	
標準	2週間	100 mg/L	30 mg/L	
間接 測定	BOD 93%	直接 測定	TOC 96%	HPLC 100%

報告書等  報告書(340KB)

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。

官報公示整理番号	2-608
CAS番号	88-09-5
物質名称	2-エチル酪酸
告示名称	アルカン酸 (C=4~30)
化審法上の規制	-
英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一代生殖毒性試験	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

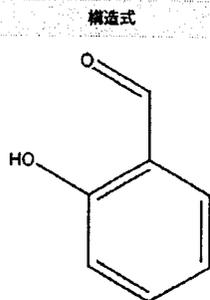
分類	既存	官報公示整理番号	3-1183
既存名簿 官報公示名称	ヒドロキシベンズアルデヒド		

(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
o-ヒドロキシベンズアルデヒド [官報公示整理番号: 3-1183,3-2660]	平成8年12月27日	分解性が良好と判断される物質

物質情報



CAS番号	90-02-8
点検対象物質名称	2-ヒドロキシベンズアルデヒド
官報公示整理番号	官報公示名称
3-1183	ヒドロキシベンズアルデヒド
3-2660	ヒドロキシベンズアルデヒド

分解性

判定	良分解性
試験方法	標準法

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	28日間	100 mg/L	30 mg/L

間接測定	BOD 6, 1, 0%	直接測定	TOC 20, 1, 1%	HPLC 100%
------	-----------------	------	------------------	--------------

報告書等	 報告書 (399KB)  報告書 (399KB)
------	--

備考

- ・被験物質は(汚泥+被験物質)系で変化し、サリチル酸(3-1640、良分解性)を生成した。
- ・逆転条件(開放系)試験では汚泥の増殖が認められ、被験物質、サリチル酸ともに残留していなかった。

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

官報公示整理番号	3-1183
CAS番号	90-02-8
物質名称	2-ヒドロキシベンズアルデヒド
告示名称	ヒドロキシベンズアルデヒド
化審法上の規制	-

英文要旨	化学物質毒性データベース(国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	- 化学物質毒性データベース(国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	- 化学物質毒性データベース(国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	-
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	- 化学物質毒性データベース(国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	5-56
既存名簿 官報公示名称	テトラヒドロフルフリルアルコール		

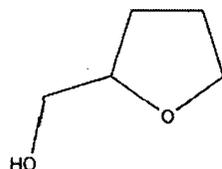
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
オキシラン-2-イルメタノール [官報公示整理番号: 5-56] [CAS番号: 97-99-4]	平成16年11月15日	難分解性ではないと判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	97-99-4
点検対象物質名称	テトラヒドロフルフリルアルコール
官報公示整理番号	5-56
官報公示名称	テトラヒドロフルフリルアルコール

分解性

判定 試験方法	良分解性 標準法		
試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	4週間	100 mg/L	30 mg/L
間接 測定	BOD 92%	直接 測定	TOC 98% GC 100%

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

官報公示整理番号	5-56
CAS番号	97-99-4
物質名称	テトラヒドロフルフリルアルコール
告示名称	テトラヒドロフルフリルアルコール
化審法上の規制	-
英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
反復・生殖併合試験(reprotox)	-
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
一代生殖毒性試験	-
その他	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	3-2259
既存名簿 官報公示名称	ジシクロヘキシルアミン		

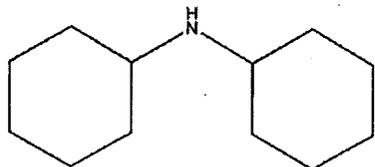
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
ジシクロヘキシルアミン	昭和52年11月30日	分解性が良好と判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	101-83-7
点検対象物質名称	ジシクロヘキシルアミン
官報公示整理番号	官報公示名称
3-2259	ジシクロヘキシルアミン
3-2686	ジシクロヘキシルアミン

分解性

判定	良分解性
試験方法	標準法

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	2週間	100 ppm	30 ppm

間接測定	BOD	直接測定	TOC	GC
	76.9%		88.6%	100%

報告書等	報告書(33KB) 報告書(33KB)
------	--

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

官報公示整理番号	3-2259
CAS番号	101-83-7
物質名称	ジシクロヘキシルアミン
告示名称	ジシクロヘキシルアミン
化審法上の規制	-

英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	-
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	-
28日間反復経口投与	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
反復・生殖併合試験(reprotox)	-
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
一世代生殖毒性試験	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-235
既存名簿 官報公示名称	ブタンジオール		

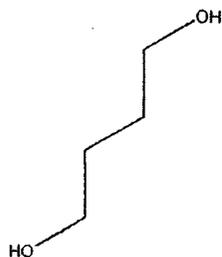
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
1, 4-ブタンジオール	平成元年12月28日	分解性が良好と判断される化学物質

物質情報

構造式



CAS番号	110-63-4
点検対象物質名称	1, 4-ブタンジオール
官報公示整理番号	2-235
官報公示名称	ブタンジオール

分解性

判定	良分解性			
試験方法	標準法			
試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度	
標準	2 週間	100 ppm	30 ppm	
間接測定	BOD 78, 74, 96%	直接測定	TOC 94, 94, 93%	GC 100, 100, 100%
報告書等	報告書 (529KB)			

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。にご留意ください。

官報公示整理番号	2-235
CAS番号	110-63-4
物質名称	1, 4-ブタンジオール
告示名称	ブタンジオール
化審法上の規制	-
英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小孩試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	-
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一世代生殖毒性試験	-
その他	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

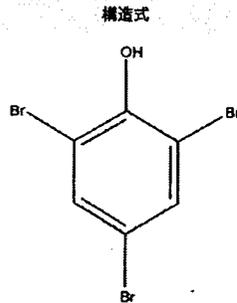
分類	既存	官報公示整理番号	3-959
既存名簿 官報公示名称	2, 4, 6-トリプロモフェノール		

(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。 それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
2, 4, 6-トリプロモフェノール	昭和56年12月25日	分解性が良好と判断される物質

物質情報



CAS番号	118-79-6
点検対象物質名称	2, 4, 6-トリプロモフェノール
官報公示整理番号	官報公示名称
3-959	2, 4, 6-トリプロモフェノール

分解性

判定	良分解性
試験方法	標準法

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	4週間	100 ppm	30 ppm

間接測定	BOD	直接測定	HPLC
	49%		63%

報告書等 報告書(118KB)

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

官報公示整理番号	3-959
CAS番号	118-79-6
物質名称	2, 4, 6-トリプロモフェノール
告示名称	2, 4, 6-トリプロモフェノール
化審法上の規制	-

英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	-
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一世代生殖毒性試験	-
その他	-



[検索](#) > [化審法化学物質検索](#) > [化審法化学物質検索結果](#) > [化審法関連情報](#)

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されま

分類	既存	官報公示整理番号	3-500
既存名簿 官報公示名称	エチルフェノール		

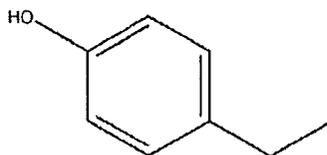
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
エチルフェノール [官報公示整理番号：3-500]	平成6年12月28日	分解性が良好と判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	123-07-9
点検対象物質名称	p-エチルフェノール
官報公示整理番号	官報公示名称
3-500	エチルフェノール
4-57	ポリ(1~3)アルキル(C=1~3)ポリ(1~3)ヒドロキシポリ(1~5)フェニル

分解性

判定 試験方法	良分解性 標準法			
試験装置 標準	試験期間 2週間	試験物質濃度 100 mg/L	活性汚泥濃度 30 mg/L	
間接 測定	BOD 90%	直接 測定	TOC 99%	HPLC 100%
報告書等	報告書 (484KB) 報告書 (484KB)			

備考

- ・エチルフェノールの位置異性体：標準条件（開放系）試験結果
- o-エチルフェノール（4週間）：分解度TOC：98%、HPLC：100%
- m-エチルフェノール（2週間）：分解度TOC：97%、HPLC：100%

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。

官報公示整理番号	3-500
CAS番号	123-07-9
物質名称	4-エチルフェノール
告示名称	エチルフェノール
化審法上の規制	-
英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
反復・生殖併合試験(reprotox)	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-1514
既存名簿 官報公示名称	メタクリロニトリル		

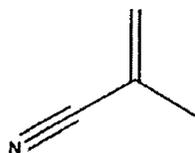
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業省公表名称	経済産業省公表年月日	経済産業省公表内容
メタクリロニトリル [官報公示整理番号: 2-1514]	平成12年3月17日	分解性が良好と判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	126-98-7
点検対象物質名称	メタクリロニトリル
官報公示整理番号	2-1514
官報公示名称	メタクリロニトリル

分解性

判定 試験方法	良分解性 標準法		
試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
揮発	28 日間	100 mg/L	30 mg/L
間接 測定	BOD(NH3) 83%	直接 測定	TOC 98% GC 100%

報告書等  報告書 (460KB)

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

官報公示整理番号	2-1514
CAS番号	126-98-7
物質名称	メタクリロニトリル
告示名称	メタクリロニトリル
化審法上の規制	-

英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	- 化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	- 化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	- 化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	- 化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一世代生殖毒性試験	-
その他	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-1291
既存名簿 官報公示名称	N, N, N-トリアルキル (又はアルケニル)	-N-カルボキシアルキル (C=1~4)	アンモニウムベ タイン

(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
2-(N-ドデシル-N, N-ジメチルアンモニオ)アセタート [官報公示整理番号: 2-1291] [CAS番号: 683-10-3]	平成16年11月15日	難分解性ではないと判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	683-10-3
点検対象物質名称	ドデシルジメチルアンモニオアセタート
官報公示整理番号	官報公示名称
2-1291	N, N, N-トリアルキル (又はアルケニル) -N-カルボキシアルキル (C=1~4) アンモニウムベ

タイン

2-2709 アルキルジメチルベタイン

分解性

判定	良分解性
試験方法	標準法

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	4週間	100 mg/L	30 mg/L

間接測定	BOD(NH3) 96%	直接測定	TOC(参考値) 98%	HPLC 100%
------	-----------------	------	-----------------	--------------

備考

・TOCは被験物質の一部が分析装置に吸着したため参考値とした。

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではないことにご留意ください。

官報公示整理番号	2-1291
CAS番号	683-10-3
物質名称	N-(カルボキシメチル)-N, N-ジメチル-1-ドデカニウム
告示名称	N, N, N-トリアルキル (又はアルケニル) -N-カルボキシアルキル (C=1~4) アンモニウムベタイン
化審法上の規制	-
英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-



[検索](#) > [化審法化学物質検索](#) > [化審法化学物質検索結果](#) > [化審法関連情報](#)

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

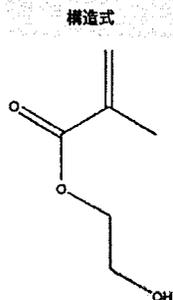
分類	既存	官報公示整理番号	2-1044
既存名簿 官報公示名称	メタクリル酸-2-ヒドロキシアルキル (C=2~8)		

(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
2-ヒドロキシエチル=メタクリラート	平成元年12月28日	分解性が良好と判断される化学物質

物質情報



CAS番号	868-77-9
点検対象物質名称	メタクリル酸-2-ヒドロキシエチル
官報公示整理番号	2-1044
官報公示名称	メタクリル酸-2-ヒドロキシアルキル (C=2~8)

分解性

判定	良分解性
試験方法	標準法

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	2週間	100 ppm	30 ppm

間接測定	BOD	直接測定	TOC	GC
	95%		87%	100%

報告書等  報告書 (687KB)

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。

官報公示整理番号	2-1044
CAS番号	868-77-9
物質名称	メタクリル酸2-ヒドロキシエチルエステル
告示名称	メタクリル酸-2-ヒドロキシアルキル (C=2~8)
化審法上の規制	-

英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	-
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	-
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一代生殖毒性試験	-
その他	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-2583
既存名簿 官報公示名称	アクリル酸ジメチルアミノエチル		

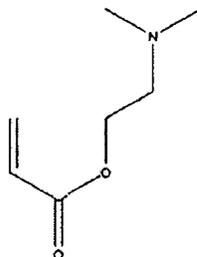
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
2-(ジメチルアミノ)エチル=アクリレート [官報公示整理番号: 2-2583]	平成5年12月28日	分解性が良好と判断される化学物質

物質情報

構造式



CAS番号	2439-35-2
点検対象物質名称	アクリル酸ジメチルアミノエチル
官報公示整理番号	2-2583
官報公示名称	アクリル酸ジメチルアミノエチル

分解性

判定	良分解性
試験方法	その他

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
-	-	-	-

備考

・被験物質は水中で加水分解し、アクリル酸 (2-0984、良分解性) 及びN,N-ジメチルエタノールアミン (2-0297、良分解性) を生成した。

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

官報公示整理番号	2-2583
CAS番号	2439-35-2
物質名称	アクリル酸 2-(ジメチルアミノ)エチルエステル
告示名称	アクリル酸ジメチルアミノエチル
化審法上の規制	-
英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	-
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一世代生殖毒性試験	-
その他	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-1047
既存名簿 官報公示名称	メタクリル酸ジメチルアミノエチル		

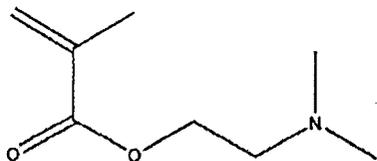
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
2- (ジメチルアミノ) エチル=メタクリラート 【官報公示整理番号: 2-1047】	平成5年12月28日	分解性が良好と判断される化学物質

物質情報

構造式



CAS番号	2867-47-2
点検対象物質名称	メタクリル酸ジメチルアミノエチル
官報公示整理番号	官報公示名称
2-1047	メタクリル酸ジメチルアミノエチル
2-1048	メタクリル酸-N, N-ジアルキル (C=1~2) アミノアルキル (C=2~3) エステル

分解性

判定 試験方法	良分解性 その他

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
-	-	-	-

備考

・被験物質は水中で加水分解し、メタクリル酸 (2-1025、良分解性) 及びN-ジメチル-N-エタノールアミン (2-0297、良分解性) を生成した。

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではないことに留意ください。

官報公示整理番号	2-1047
CAS番号	2867-47-2
物質名称	2- (ジメチルアミノ) エチルメタクリラート
告示名称	メタクリル酸ジメチルアミノエチル
化学法上の規制	-

英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験 (reprotox)	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一代生殖毒性試験	-
その他	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-798
既存名簿 官報公示名称	脂肪酸 (C=9~24) アルキル (C=1~12) エステル		

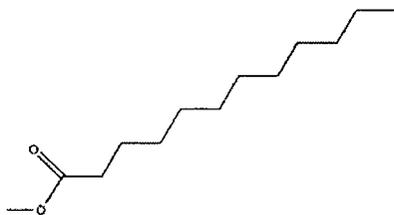
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
メチル=ドデカノアート [官報公示整理番号: 2-798]	平成7年12月28日	分解性が良好と判断される物質

物質情報

構造式



CAS番号	111-82-0
点検対象物質名称	ドデカン酸メチル
官報公示整理番号	2-798
官報公示名称	脂肪酸 (C=9~24) アルキル (C=1~12) エステル

分解性

判定	良分解性		
試験方法	標準法		
試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	4週間	100 mg/L	30 mg/L
間接測定	BOD 78%	直接測定	GC 100%

備考

・被験物質は水中で一部加水分解し、ドデカン酸 (2-0608) 及びメタノール (2-0201、良分解性) を生成した。

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

官報公示整理番号	2-798
CAS番号	111-82-0
物質名称	ドデカン酸メチルエステル
告示名称	脂肪酸 (C=9~24) アルキル (C=1~12) エステル
化審法上の規制	-

英文要旨	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
AMES試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
染色体異常試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
小核試験	-
マウスリンフォーマTK試験	-
単回投与毒性試験	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
28日間反復経口投与	-
反復・生殖併合試験(reprotox)	化学物質毒性データベース (国立医薬品食品衛生研究所)
90日間試験反復経口投与	-
慢性毒性試験	-
発がん性試験	-
経口投与簡易生殖試験	-
一代生殖毒性試験	-



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-66
既存名簿 官報公示名称	モノ又はジクロロアルカン (C6~24)		

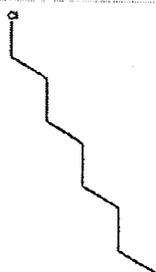
(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
1-クロロオクタン [官報公示整理番号: 2-66]	平成3年12月27日	分解性が良好と判断される化学物質

物質情報

構造式



CAS番号	111-85-3
点検対象物質名称	1-クロロオクタン
官報公示整理番号	官報公示名称
2-66	モノ又はジクロロアルカン (C6~24)
2-68	塩化ノルマルパラフィン (C8~22)

分解性

判定	良分解性
試験方法	標準法

試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
揮発	4週間	100 ppm	30 ppm

間接測定	BOD	直接測定	GC
	77%		100%

報告書等	報告書(392KB) 報告書(392KB)
------	--

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。

該当データがありません

生態影響試験結果 データの説明

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。

物質名称	1-クロロオクタン
CAS番号	111-85-3
官報公示番号	2-66

生物種	藻類 (セテナストラム)				甲殻類 (オオミジンコ)		
	生長阻害				急性遊泳阻害	繁殖阻害	
	(速度法)		(面積法)		48hr-EC50	21day-EC	21day-NO EC
エンドポイント	72hr-EC50	72hr-NOE	72hr-EC50	72hr-NOE			
	0	C	0	C		50	EC
濃度 (mg/L)	>0.27	0.27	>4.4	0.18	0.21	0.11	0.073
試験実施年度	1998		1998		1998	1998	
出典	MOE		MOE		MOE	MOE	
報告書等							

生物種	魚類 (ヒメダカ)		
試験	急性毒性	延長毒性	初期生活



検索 > 化審法化学物質検索 > 化審法化学物質検索結果 > 化審法関連情報

化審法情報 データの説明

各表中の「分類」欄において「特定できず」と記載されているものは、それぞれの法律の対象物質に該当していない場合、又は、法律では「〇〇化合物」のように包括的な名称で指定されていることから対象物質であるか否かを特定できない場合に表示されます。

分類	既存	官報公示整理番号	2-176
既存名簿 官報公示名称	N, N, N-トリアルキル (又はアルケニル, アルキル又はアルケニルのうち少くとも1個はC8~24で他はH又はC1~5) アミン		

(注意) 当データベースでは官報公示名称(既存化学物質)は、既存名簿の1類から5類及び9類の一部の物質の官報公示名称に対してのみCAS番号を付与しています。それ以外の既存化学物質、白物質にはCAS番号を付与していないため、「分類」欄において「特定できず」と表示されます。

既存化学物質安全性点検データ (分解性・濃縮性) データの説明 分解性

経済産業公報公表名称	経済産業公報公表年月日	経済産業公報公表内容
N, N-ジメチルオクタデシルアミン	平成元年12月28日	分解性が良好と判断される化学物質

物質情報

構造式



CAS番号	124-28-7
点検対象物質名称	N, N-ジメチル-n-オクタデシルアミン
官報公示整理番号	官報公示名称
2-176	N, N, N-トリアルキル (又はアルケニル, アルキル又はアルケニルのうち少くとも1個はC8~24で他はH又はC1~5) アミン
2-185	N-アルキル [又はアルケニル (C=16~28)] -N, N-ジアルキル (C=1~5又はH) アミン

分解性

判定	良分解性		
試験方法	逆転法		
試験装置	試験期間	試験物質濃度	活性汚泥濃度
標準	4週間	30 ppm	100 ppm
間接測定	BOD	直接測定	GC
	51, 72, 46%		100, 100, 100%
報告書等	<input checked="" type="checkbox"/> 報告書 (565KB) <input checked="" type="checkbox"/> 報告書 (565KB)		

人健康影響試験結果 データの説明

詳細情報

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

該当データがありません

生態影響試験結果 データの説明

試験結果は試験実施機関の判断を示しており、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に係る審議会等において判定したものではありません。ご注意ください。

物質名称	N-n-オクタデシル-N, N-ジメチルアミン
CAS番号	124-28-7
官報公示番号	2-176

生物種 試験	藻類 (セテナストラム)				甲殻類 (オオミジンコ)		
	生長阻害				急性遊泳阻害	繁殖阻害	
	(速度法)		(面積法)			21day-EC50	21day-NOEC
エンドポイント	72hr-EC50	72hr-NOEC	72hr-EC50	72hr-NOEC	48hr-EC50		
	0	C	0	C		50	EC
濃度 (mg/L)	0.0018	0.00099	0.0075	0.0039	0.016	0.022	0.0063
試験実施年度	2000		2000		2000	2000	
出典	MOE		MOE		MOE	MOE	
報告書等							
生物種	魚類 (ヒメダカ)						
試験	急性毒性			延長毒性			初期生活