

【資料1】生態影響試験の信頼性評価のまとめ

下記の2物質については、それぞれ生態影響試験結果が得られているので、各データをJapanチャレンジプログラムでもちいるカテゴリーアプローチ用テンプレートに要約し、データの信頼性評価を行った。

結果は以下の通りであった。

2-secブチルフェノール (89-72-5)

環境省は平成10年度に、藻類・ミジンコ・魚類の急性毒性試験を実施した。それぞれはOECDテストガイドラインによる試験を、GLP基準を適用して実施された。この試験の内、藻類生長阻害試験については、OECDテストガイドラインが2006年4月に改定されて試験の妥当性クライテリアが変更されたことから、環境省は新たなクライテリアに基づいてこの試験を見直した。クライテリアを満足した試験については、さらに毒性値の再計算を行い、その結果を生態影響試験結果一覧(最新版は平成20年3月版;環境省ホームページ)に発表している。GLP最終報告書をもとに試験法の詳細について点検した結果、テストガイドラインからの逸脱は見られず本試験データは信頼性が高いと判断された。

4-secブチルフェノール (99-71-8)

環境省は平成16年度に、藻類・ミジンコ・魚類の急性毒性試験およびミジンコ繁殖試験を、OECDテストガイドラインによりGLP基準を適用して実施した。入手したGLP最終報告書をもとに試験法の詳細について点検した結果、テストガイドラインからの逸脱は許容できる範囲であった。そのことから、本試験データは信頼性が高いと判断された。

4.2.2.4. カテゴリーアプローチ適用可能性及びカテゴリーマトリックスの作成

環境毒性値と環境毒性値の信頼性評価に必要な物理化学的性状および環境運命情報について、予測値を

加え(表中の推定値)、さらにカテゴリーアプローチによるリードアクロス手法によりデータの補完を試みた(Table 61)。

Table 61. secブチルフェノールの環境運命及び環境毒性に関するカテゴリーアプローチ

物質名	2-secブチルフェノール	3-secブチルフェノール	4-secブチルフェノール
物理化学的性状			
融点	既知		既知
沸点	既知		既知
密度			
蒸気圧	0.023(hPa, 25℃、推定)		既知
分配係数	既知		既知
水溶解度	319(推定)		既知
解離定数	pKa= 9.9-10.9(推定)	pKa= 9.9-10.9(推定)	pKa= 9.9-10.9(推定)
環境運命			
安定性			
モニタリングデータ			
好氣的生分解	既知		既知
BOD5、COD	—	—	—
生物濃縮 (BCF)	既知	—	既知
環境毒性			
魚類への急性毒性	既知	96hLC50 = 2.6-6.9 mg/L Read across	既知

ミジンコへの急性毒性	既知	8hEC50=3.1-4.0 mg/L Read across	既知
藻類への毒性	既知	72hErC50=6.9-7.5 mg/L Read across	既知
微生物への毒性	-	-	-
水生生物への慢性毒性	既知	72hNOErC=0.44 mg/L Read across	既知
陸生生物への毒性	-	-	-
物理的影響のモニタリング			
生体内変換と動態	-	-	-

4.2.2.5. データギャップの補完

(1) 既存データを基に構成員間の関係特性の確認

sec-ブチルフェノールの環境毒性を検討するうえで、このカテゴリーの特性としては次のような点が特筆される。

- 1) 高い水溶解度と酸解離定数（概ね 10 程度）を有していること。
- 2) 加水分解する構造をもたず水中での安定性は高いこと。ただし、概ね 10 程度の pKa を有しており、高い pH レベルでは解離状態にあること（弱い酸となる）。
- 3) 水オクタノール分配係数は 3-3.5 程度であり、水中に存在する場合には比較的にやく生物体内に取り込まれることが予想されること。
- 4) 土壌および水中に主に配分され、底質中には移行しにくい物質であることから、水中生物では底生生物への影響は起こりにくいと考えられること。
- 5) 既存情報から生分解性は低いため、長期慢性毒性試験でも安定したばく露が可能であること（試験による慢性毒性値は信頼性を低くする原因が少ない）。
- 6) 毒性試験を行って得られた毒性値は、ECOSAR による毒性予測値（ドメイン：アルキルフェノール類）とは概ね一致していることから、毒性メカニズムは麻酔作用と考えられる。
- 7) ECOSAR による予測値は、本カテゴリーの異性体を区別することはないが、もし麻酔作用が（主な）毒性メカニズムであるならば、異性体間に毒性の差はないとみてよい。

以上から、藻類生長阻害試験において密閉式で行った場合や、pH が 10 に達するような場合には、化学物質の生物利用可能性が低下して毒性を低く見積もる可能性がある。よって、*2-sec*-ブチルフェノールの慢性毒性値については毒性値の信頼性は制限付

とすべきである。

(2) データギャップ、および信頼性の低いデータ補完

OECD-HPV マニュアル第 3 章 2 節（ガイダンスドキュメント 80）*の 6.4 節では、類似物質を用いたカテゴリーアプローチの中で、異性体を用いた場合の手法について規定している。その中で、毒性値の推定に関しては次のように述べている。

c) for toxicological endpoints (e.g. LC50, NOAEL), a range of toxicity or the lowest value in a range of toxicity may be used for read-across.

ここでは、ここで示されているように、リードアクロスからの推定については、範囲または低値を用いることにした。リードアクロスからの推定は Table 61 に示した。

魚類急性毒性 信頼性が 1 のデータが *2-sec*-ブチルフェノールでは、96hLC50 値=6.0 と 6.9mg/L の 2 つが、*4-sec*-ブチルフェノールでは同 2.6mg/L があった。そのため、*3-sec*-ブチルフェノールの毒性値は、範囲 2.6-6.9mg/L もしくは、低値を採用して 2.6mg/L である。なお、信頼性 2 のデータは 48 時間ばく露の毒性値であり、96 時間までばく露した場合にはこの値を下回るであろうことから、今回の推定には用いなかった。

ミジンコ急性毒性 信頼性が 1 の毒性値が *2-sec*-ブチルフェノールと *4-sec*-ブチルフェノールで各 1 つ得られていることから、*3-sec*-ブチルフェノールの毒性値 48hEC50=3.1-4.0 mg/L とした。

藻類急性毒性 信頼性が 1 の毒性値が *2-sec*-ブチルフェノールと *4-sec*-ブチルフェノールで各 1 つ得ら

れていることから、3-secブチルフェノールの毒性値 72hErC50 = 6.9 - 7.5 mg/L とした。

魚類慢性毒性 既存データが得られていないので、推定できない。

ミジンコ慢性毒性 既存データは、2-secブチルフェノールからでのみ得られている。3-secブチルフェノールもしくは4-secブチルフェノールで実測データが得られていないので推定できない。ただし、構造活性相関からの推定値が 0.32 mg/L であり、実測値にきわめて近いことから、3-secブチルフェノールおよび4-secブチルフェノールの毒性値は同程度と見込まれる。

藻類慢性毒性値 既存データは4-secブチルフェノールでは信頼性1であるが、2-secブチルフェノールではすでに述べた理由で信頼性を2とした。そのため、3-secブチルフェノールの毒性は、4-secブチルフェノールの毒性値から推定することとし、72h NOErC = 0.44 mg/L と推定した。

(3) さらなる情報の入手・追加試験の提案

水生生物の3栄養段階の生物種についての急性毒性試験結果は得られており初期評価には十分な試験結果が得られている。しかしながら、secブチルフェノールのどの異性体においても、微生物への毒性および陸生生物への毒性に関しては情報が得られなかった。環境分配予測では水中および土壌が主なターゲットであることから、詳細なリスク評価の段階では土壌生物への有害性情報およびよく露情報を収集する必要がある。

* : SERIES ON TESTING AND ASSESSMENT Number 80 GUIDANCE ON GROUPING OF CHEMICALS (OECD, 2007;)電子ファイルのみ

4.2.2.6. 結論と考察

(1) カテゴリーメンバーについて

secブチルフェノールに関して、環境毒性に焦点をあてた検討を行ってきたが、結論としては本カテゴリーについては、異性体に関する情報を用いた初期段階の評価は可能であり、限られた範囲ではすでにデータも揃っており、現段階で初期評価は可能である。

本検討においては、tertブチルフェノールを加えたカテゴリー判断は行わなかったが、4-tert-Butylphenolについては、OECD-SIAM で過

去に議論されており評価書が入手できる*。ただし、ここで得られた毒性値は GLP 試験ではないこと、データの詳細が不明であること、試験には溶解助剤として溶剤 (DMSO) と界面活性作用のある分散財 (HCO-40) が用いられていること、試験溶液中の被験物質濃度は実測していないことなど、現時点での判断では決して信頼性が高いデータとは言えない。そのため、本検討での利用は控えたが、毒性値そのものはよく似た傾向を示している。

(2) 構造活性相関との関係

現在開発されている構造活性相関式は、ドメインの選択を化学物質の部分構造によっていることから、本検討で用いた、(Q)SAR モデル ECOSAR では3つの異性体を区別できていない。しかしながら、経験的にも今回検討した異性体はよく似た毒性を示していると考えられ、結論には誤りはないと考えられる。しかしながら、毒性発現のメカニズムを重視して、化学物質の生体分子との結合性や体内での挙動・代謝経路の類似性からカテゴリーを構成する方法が主張されている。ただし、そのような情報や判定プログラムは環境毒性のためのモデル生物を対象としていないことから、たとえそのような情報があったとしても、参考情報にとどめるべきであろう。つまり哺乳類を用いた知見は魚類の毒性判断には利用できるが藻類にも利用できるか疑問が出されるであろう。現段階では、(Q)SAR 予測と一致していれば同様の毒性上の特性を示すものと判断せざるをえない。

ただし、今回用いた ECSAR は、その予測精度は魚類 > ミジンコ > 藻類の順であり、特に藻類の予測はあまりよくない。そのため、構造活性相関による (Q)SAR 結果は他の2生物群ほどには信頼できない。

* : OECD のホームページ OECD Integrated HPV Database (<http://cs3.hq.oecd.org/scripts/hpv/>) 参照

4.3. ヒト健康影響

Table 62. にヒト健康影響に関する調査結果を示す。

Table 62. sec-ブチルフェノールのヒト健康影響

物質		2-secブチルフェノール	3-secブチルフェノール	4-secブチルフェノール
急性毒性	急性経口	ラット*1 LD50: 320 mg/kg ----- ラット*2 LD50: 500~1000 mg/kg (OECD TG 401、 GLP) ----- モルモット*3 LD50: 600 mg/kg	—	ラット*6 LD50: 2450 mg/kg
	急性吸入	ラット*1 LC50: > 290 ppm/4h		
	急性経皮	モルモット*3 LD50: 600 mg/kg ----- ウサギ*1 LD50: 5560 mg/kg		
刺激性	皮膚刺激性	有り*4		
	眼刺激性	有り*4	—	—
感受性	皮膚感受性	—	—	—
反復投与毒性	反復投与毒性	ラット*2、強制経口 雄: 交配前 14 日~42 日間 雌: 交配前 14 日~哺育 3 日 0、12、60、300 mg/kg bw/d NOAEL: 雄: 12 mg/kg bw/d 雌: 60 mg/kg bw/d (OECD TG 422、 GLP)		ラット*7、強制経口 28 日間 0、100、300、1000 mg/kg bw/d NOAEL: 100 mg/kg bw/d (日本のガイドライン、 GLP)
変異原性	AMES	陰性 (S9+)、陰性 (S9-)*2 (OECD TG 471&472、 GLP) ----- 陰性 (S9+)、陰性 (S9-)*5		陰性 (S9+)、陰性 (S9-)*7 (日本のガイドライン、 GLP)
	染色体	陽性 (S9+)、陽性 (S9-)*2 (OECD TG 473、 GLP)	—	陰性 (S9+)、陰性 (S9-)*7 (日本のガイドライン、 GLP)
	<i>in vivo</i> 小核	—	—	—
発がん性	発がん性	—	—	—
生殖発生毒性	生殖発生毒性	ラット*2、強制経口 雄: 交配前 14 日~42 日間 雌: 交配前 14 日~哺育 3 日 0、12、60、300 mg/kg bw/d NOAEL: 300 mg/kg bw/d (OECD TG 422、 GLP)	—	—

—: 報告なし

*1: 入手困難のため RTECS から引用 (National Technical Information Service OTS0572448)

*2: 化学物質毒性試験報告 Vol.7、207-236 (1999)

*3: Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices, 5th ed. 5, 84 (1986)

*4: チェコ文献のため RTECS から引用 (Marhold J. Prehled Prumyslove Toxikologie: Organické Latky, Prague, Czech., Avicenum 224, (1986))

*5: Mortelmans et al. Salmonella Mutagenicity Tests: II. Results from the Testing of 270 Chemicals: Environ. Mutagen. 8(Suppl. 7), 1-119 (1986)

*6: Hasegawa et al. Acute Toxicity Test on 113 Environmental Chemicals, Science Reports of the Research Institutes, Tohoku University, Series C: Medicine. 36(1-4), 10-16 (1989)

*7: 化学物質毒性試験報告 Vol.2, 329-351 (1991)

4.3.1. 急性毒性

経口

2-sec ブチルフェノールに関しては、ラット及びモルモットを用いた試験において LD₅₀ の報告があった。厚生労働省の既存化学物質安全性点検プログラムにおいて、ラットを用いる単回経口投与毒性試験 (OECD テストガイドライン 401 準拠、GLP 条件下) が実施され、本物質投与により雌雄とも自発運動の低下や腹臥位/側臥位/うずくまり姿勢、歩行異常がみられ、雄では 1000 mg/kg 以上の全例で、雌では 1000 mg/kg 以上の投与群で死亡が認められた。(LD₅₀: 500~1000 mg/kg) また、二次資料として、ラットの LD₅₀: 320 mg/kg、モルモットの LD₅₀: 600 mg/kg が得られた。

4-sec ブチルフェノールに関しては、ラットを用いた試験による LD₅₀ の報告があり、LD₅₀: 2450 mg/kg が得られた。

3-sec ブチルフェノールの急性経口毒性に関する報告はなかった。

吸入

2-sec ブチルフェノールに関しては、二次資料として、ラットを用いた試験による LC₅₀ の報告があり、LC₅₀: > 290 ppm/4h が得られた。

その他の異性体の急性吸入毒性に関する報告はなかった。

経皮

2-sec ブチルフェノールに関しては、二次資料として、モルモットとウサギを用いた試験による LD₅₀ の報告があり、LD₅₀: 600 mg/kg (モルモット)、600 mg/kg (ウサギ) が得られた。

その他の異性体の急性経皮毒性に関する報告はなかった。

4.3.2. 皮膚・眼刺激性及び皮膚感受性

2-sec ブチルフェノールに関しては、二次資料として、ウサギの皮膚及び眼への刺激性の報告があった。

その他の異性体の刺激性に関する報告はなかった。

皮膚感受性についてはいずれの異性体についても情報が得られなかった。

4.3.3. 反復投与毒性

2-sec ブチルフェノールに関しては、厚生労働省の既存化学物質安全性点検プログラムにおいて、反復経口投与毒性・生殖発生毒性併合試験 (OECD テストガイドライン 422 準拠、GLP 条件下) が実施されている。0、12、60 及び 300 mg/kg/day の用量で雄ラットには交配 14 日前から 42 日間、雌ラットには交配 14 日前から、交配及び妊娠期間を通して分娩後 3 日まで強制経口投与した。結果、300 mg/kg 投与群では、雌雄で一過性の流涎や活動性の低下がみられ、雌ではふらつき歩行も観察された。同群の雌雄で肝臓の相対重量が増加し、雄では小葉中心性肝細胞肥大が観察された。雄について実施した血液生化学検査では、同群で総コレステロール濃度の増加が認められた。60 mg/kg 投与群では、投与初期に自発運動の減少が少数例の雄に観察された。生殖発生への影響などの投与群でも認められなかった。これらの結果から、反復投与毒性の NOAEL は雄では 12 mg/kg/day、雌では 60 mg/kg/day と判断された。

4-sec ブチルフェノールに関しては、OECD による既存化学物質の安全点検に係る毒性調査事業の一環として、28 日間反復経口投与毒性試験 (日本のテストガイドライン準拠、GLP 条件下) が実施されている。0、100、300 及び 1000 mg/kg/day の用量で雌雄ラットに 28 日間強制経口投与した結果、全投与群で一過性の流涎がみられた。1000 mg/kg 投与群の雌雄で呼吸音の異常、粗大呼吸、開口呼吸がみられ、さらに、雄では体重の低値も認められた。また、同群において、雌で GPT・GOT 活性の増加、雄ではブドウ糖・カリウム濃度の減少、ナトリウム濃度・GPT 活性・γ-GTP 活性の増加が認められた。病理学的検査において、1000 mg/kg 投与群の雌雄全例に前胃粘膜上皮の過形成がみられ、雄 2 例と雌 3 例では腎乳頭壊死も観察された。また、300 mg/kg 投与群の雄 1 例では腎乳頭壊死・前胃粘膜上皮の過形成がみられた。さらに、腎乳頭壊死の認められなかった 1000 mg/kg 投与群の雄 1 例、300 mg/kg 投与群の雌雄各 1 例では、腎乳頭先端部の間質にエオジンに淡染する小塊状あるいは微細顆粒状を呈する物質が少量認められた。これらの結果から、反復投与毒性の NOAEL は 100 mg/kg/day と判断された。

2-sec ブチルフェノールに関しては OECD テスト

ガイドラインに従って実施された AMES 試験および *in vitro* 染色体異常試験 (チャイニーズ・ハムスタ肺由来の線維芽細胞株(CHL/IU)) の報告がある。AMES 試験では、代謝活性化の有無にかかわらず陰性結果が得られたが、*in vitro* 染色体異常試験では、代謝活性化の有無にかかわらず、染色体構造異常細胞の増加が認められた。その他、Mortelmans らの AMES 試験でも代謝活性化の有無にかかわらず陰性結果が得られた。*in vivo* 小核試験の報告は無かった。

4-secブチルフェノールに関しては、日本のテストガイドラインに従って実施された AMES 試験および *in vitro* 染色体異常試験 (CHL/IU) の報告がある。AMES 試験および *in vitro* 染色体異常試験では、代謝活性化の有無にかかわらず陰性結果が得られた。

3-secブチルフェノールに関しては、AMES 試験、*in vitro* 染色体異常試験および *in vivo* 小核試験の報告は無かった。

4.3.5. 発がん性

いずれの異性体についても発がん性に関する報告はなかった。

毒性

2-secブチルフェノールに関しては、Table 62 に示すように、反復経口投与毒性・生殖発生毒性併合試験が実施されている。0、12、60 及び 300 mg/kg/day の用量で雄ラットには交配 14 日前から 42 日間、雌ラットには交配 14 日前から、交配及び妊娠期間を通して分娩後 3 日まで強制経口投与した結果、雌雄の交尾率・受胎率、雌の妊娠維持・分娩・哺育、児の生存性・性比・発育・形態に影響は認められなかった。これらの結果から、生殖発生毒性の NOAEL は 300 mg/kg/day と判断された。

その他の異性体の生殖発生毒性に関する報告はなかった。

4.3.7. カテゴリーアプローチ適用可能性

急性毒性、反復毒性、変異原性において、2-secブチルフェノールおよび 4-secブチルフェノールに関して、急性経口試験、反復投与試験、AMES 試験及び *in vitro* 染色体異常試験の信頼あるデータが得られた。染色体試験では、2-secブチルフェノールは陽性、4-secブチルフェノールは陰性、反復投与試験において、2-secブチルフェノールの主たる標的機関は肝であり、4-secブチルフェノールでは腎であること、また、生殖発生毒性に関しては 2-secブチルフェノールの結果のみであることから、今後、3-または 4-secブチルフェノールについて生殖発生毒性試験の実施とともに、毒性徴候の差異を詳細に検討する必要がある。

4.4. 考察

Japan チャレンジプログラムにリストアップされている物質のうちスポンサー登録がなされていない物質から、2-secブチルフェノールを選択し、その構造異性体 (3-secブチルフェノール及び 4-secブチルフェノール) とのカテゴリー評価の妥当性について検証を行った。その結果、物理化学的性状をカテゴリー評価することに関し、特に大きな問題は無い。しかしながら、4-secブチルフェノールは、他の 2 物質に比べて、高い融点を示すことに注意が必要である。環境毒性に関しては、本物質の異性体に関する情報を用いた初期段階の評価は可能であり、限られた範囲ですでにデータも揃っており、現段階で初期評価は可能である、と考えられた。しかし、ヒト健康影響に関しては、2-secブチルフェノールおよび 4-secブチルフェノールに関して、急性経口試験、反復投与試験、AMES 試験及び *in vitro* 染色体異常試験の信頼可能なデータが得られているが、染色体試験結果及び反復投与試験の毒性徴候が異なることから、ヒト毒に関してのみカテゴリーアプローチを行うことに問題があると思われる。

安全で安心な社会を構築していくにあたり、化学物質の安全性を評価することは益々重要になってきている。社会で用いられている化学物質の数は膨大であり、その一つ一つを評価することは、大変な時間と費用を必要とする。カテゴリー評価は、このような時間と費用を大幅に削減するものであり、科学的知見に基づくことを前提として、今後の更なる適用が求められるが、今回のようなに構造異性体でカテゴリーを組んだ場合、ヒト毒で毒性徴候が異なる場合、分布や代謝試験等の詳細な追加試験が必要となる場合が想定された。

4.5. 結論

ヒト健康影響分野以外について、secブチルフェノールの構造異性体のカテゴリーアプローチは適用可能であることがわかった。

5. Japan チャレンジプログラムにおけるカテゴリーアプローチに関する検討

5.1. 始めに

日本においては、年間10万種近い化学物質が生産されており、うち数千物質は製造量が1,000トンを超える高生産量物質とみなされている。これら化学物質は工業用途に使用されるのみならず、日用品として広く国民の間で使用されるものが数多く存在する。それらの毒性学的特徴を把握することはヒトへの健康危害を考える上で極めて重要であるが、安全性の評価が終了しているものは非常に少ない。特に既存化学物質(日本においては約2万物質)であって、その毒性が未だ明らかになっていないものが数多く存在する。これらの既存化学物質の迅速な安全性評

価を目的として、国と産業界が連携して既存化学物質の安全性評価情報を収集し、発信する「官民連携既存化学物質安全性情報収集・発信プログラム（通称Japanチャレンジプログラム）」が2005年から開始された。まず、年間製造・輸入量1,000トン以上の物質を選定し、それらの既存化学物質について安全性評価を行う事となった。その際に評価の効率化を目的として、Japanチャレンジプログラムでは、物質と構造的、物理化学的および毒性学的性質の類似性や規則的なパターンを示すと予想される物質のグループ化を行う「カテゴリーアプローチ手法」が推奨された。

5.2. カテゴリーアプローチを行った既存化学物質

Japanチャレンジプログラムの掲載物質で、カテゴリーアプローチ手法を元に、カテゴリーが可能か否かの検討を行ったので報告する。評価した化合物群を下記に記載する。

A. オルソ酢酸トリメチル

- ・オルソギ酸メチル(CAS No. 149-73-5)
- ・オルソギ酸エチル(CAS No. 1445-45-0)
- ・オルソギ酸n-プロピル(CAS No. 43083-12-1)
- ・オルソ酢酸メチル(CAS No. 122-51-0)
- ・オルソ酢酸エチル(CAS No. 78-39-7)
- ・オルソプロピオン酸エチル(CAS No. 115-80-0)
- ・オルソ-N-酢酸メチル(CAS No. 621-76-1)

上記7物質でカテゴリーを想定していたが、加水分解することが判明したので、分解物の酸とアルコールで再度カテゴリーを構築する事と成った。

B. 脂肪酸クロライド

- ・ラウリルクロライド(CAS No. 122-16-3)
- ・ステアロイルクロライド(CAS No. 122-76-5)
- ・脂肪酸クロライド(CAS No. 68187-89-3)

上記の物質は水との反応で急速に分解し、塩酸と脂肪酸に分かれることから、脂肪酸でカテゴリーを組み、そのカテゴリーから一括して直鎖脂肪酸クロライドのカテゴリーを再度類推することとなった。塩酸については、既にOECDで評価済みである。

C. t-ブチル=メタクリレート

- ・メタクリル酸エチル(EMA)(CAS No. 97-63-2)
- ・メタクリル酸i-ブチル(iBMA)(CAS No. 97-86-9)
- ・メタクリル酸n-ブチル(nBMA)(CAS No. 97-88-1)
- ・メタクリル酸2-エチルヘキシル(EHMA)(CAS No. 688-84-6)
- ・メタクリル酸メチル(MMA)(CAS No. 80-62-6)
- ・メタクリル酸エチルt-ブチル(tBMA)(CAS No. 585-07-9)

メタクリル酸t-ブチルについては、他の化合物の

側鎖の構造が異なることから、毒性的挙動が異なる可能性が考えられる。t-ブチルを含む化合物のカテゴリーへの取り組みについては、今後の検討課題であるが、マトリックスを製作する方向となった。今後は、メタクリル酸t-ブチルの環境毒性、簡易生殖試験、小核試験を実施する事となった。Table 63にマトリックス案を示す。

D. 脂肪酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩

- ・テトラデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩(C14-MES)(CAS No. 4016-22-2)
- ・ヘキサデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩(C16-MES)(CAS No. 4016-24-4)
- ・オクタデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩(C18-MES)(CAS No. 4062-78-6)

脂肪酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩(MES)は、脂肪酸メチルエステルの第2位の炭素にスルホン酸が付加した構造をする陰イオン界面活性剤である。これら3物質は、疎水基に直鎖飽和脂肪酸炭化水素を有し、その炭素鎖長のみがC14、C16およびC18と異なる。本カテゴリーは外側のC18を推測する特異なケースであり、外側を推測して、検証をするという研究的ケースであることから、提示された物質を含めた類似物質の吸排試験についての文献検索を行い、評価文章中に内容を盛り込む事となった。Table 64にマトリックス案を示す。

E. 無水ピロメリット酸

- ・ベンゼン-1,2,4,5-テトラカルボン酸二水和物[無水ピロメリット酸](CAS No. 89-32-7)
- ・1,2,4,5-ベンゼンテトラカルボン酸ピロメリット酸(CAS No. 89-05-4)

無水ピロメリット酸とピロメリット酸のカテゴリーは確認されたが、無水ピロメリット酸は不安定で、加水分解することから、試験はピロメリット酸で行い、リードアクロスする事となった。Table 65にマトリックス案を示す。

F. シュウ酸二水和物

- ・シュウ酸二水和物(CAS No. 6153-56-6)
- ・無水シュウ酸(CAS No. 144-62-7)

無水シュウ酸は水に溶解する二水和物になることからカテゴリーは可能と考えられた。Table 66にマトリックス案を示す。

G. 2-ペンテン

- ・1-ブテン(CAS No. 106-98-9)
- ・2-ブテン(CAS No. 107-01-7)
- ・1-ペンテン(CAS No. 109-67-1)
- ・2-ペンテン(CAS No. 109-68-2)

- ・1-ヘキセン(CAS No. 592-41-6)
- ・2-ヘキセン(CAS No. 592-43-8)

1-ブテン、2-ブテン及び1-ヘキセンについては、OECD またはUS-EPA で評価が済んでいる。1-ペンテン及び2-ヘキセンについては、カテゴリーとしての評価データがあることから、6物質のカテゴリーは可能と考えられた。Table 67 にマトリックス案を示す。

H. ビスフェノールAエチレンオキシド付加物と ビスフェノールAプロピレンオキシド(2~約20 モル)付加物

- ・ビスフェノールA-PO 2 モル付加物(CAS No.116-37-0)[A-PO2]
- ・ビスフェノールA-PO 5 モル付加物(CAS No. 37353-75-6)[A-PO5]
- ・ビスフェノールA-EO 2 モル付加物(CAS No.901-44-0)[E-PO2]
- ・ビスフェノールA-EO 5 モル付加物(CAS No. 32492-61-8)[E-PO5]

上記物質は単独物質としては存在せずに種々のモル数の物質の混合物である。

一般的情報、物理化学的性質、生態毒性については試験を行い、PO と EO では、分配係数が大きく異なることから、上記の試験結果からカテゴリー化については判断することになった。また、ヒト毒性については、情報が皆無なので、5モルの物質について試験を実施し、その結果から次ぎの試験を行うか否かを決定する事になった。Table 68 にマトリックス案を示す。

I. グリシン

- ・グリシン(CAS No. 56-40-6)
- ・グリシンナトリウム(CAS No. 6000-44-8)

2物質ともJapan チャレンジプログラム候補物質であり、カテゴリー化について問題がないと考えられた。Table 69 にマトリックス案を示す。

J. HCFC-225

- ・HCFC-225ca(CAS No.422-56-0)
- ・HCFC-225cb(CAS No.507-55-1)
- ・市販製品(上記2物質の混合物)
- ・HCFC-123(CAS No.306-83-2)
- ・HCFC-124 (CAS No.2837-89-0)
- ・HCFC-125 (CAS No.354-33-6)

上記の物質のカテゴリー化について問題がないと考えられた。Table 70 にマトリックス案を示す。

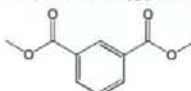
K. ピグメントイエロー14

- ・Pigment Yellow 14 (CAS No. 5468-75-7)
 - ・Pigment Yellow 55 (CAS No. 6358-37-8)
 - ・Pigment Yellow 17 (CAS No. 4531-49-1)
- [以下3物質はSIAM16でカテゴリーとして評価済み]
- ・Pigment Yellow 12 (CAS No. 6358-85-6)
 - ・Pigment Yellow 13 (CAS No. 5102-83-0)
 - ・Pigment Yellow 83 (CAS No. 5567-15-7)

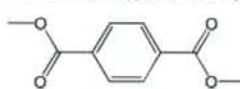
物理化学的立場では、カテゴリー化について問題は無い。環境運命の立場では、SIAM16で蓄積性がfather work となっていることから、最終報告書を確認後、判断を行う。ヒト毒性についてはPigment Yellow 14の簡易生殖試験を実施して、リードアクロスをを行うこととなった。Table 71 にマトリックス案を示す。

L. イソフタル酸ジメチル

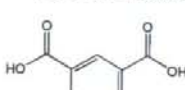
- ・イソフタル酸ジメチル(CAS No. 1459-93-4)



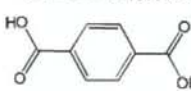
- ・テレフタル酸ジメチル(CAS No. 120-61-6)



- ・イソフタル酸(CAS No. 121-91-5)



- ・テレフタル酸(CAS No. 100-21-0)

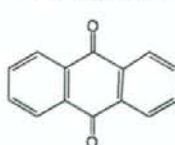


[上記2物質はOECDで評価済み]

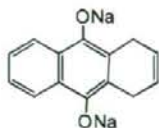
4化合物でマトリックスを作製し、補充すべき試験について再度検討することとなった。

M. アントラキノン

- ・アントラキノン(CAS No. 84-65-1)



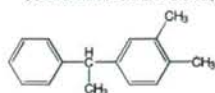
- ・1,4-ジヒドロ-9,10-アントラセンジオールのNa塩(CAS No. 73347-80-5)[SAQ]



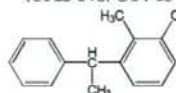
SAQ は空気中ですぐに酸化されて分解性良好なアントラキノンに変化する。このため SAQ については安全性データの測定が出来ない。以上のことからアントラキノンおよび SAQ をカテゴリー可と考えられる。

N. ジメチル(フェニルエチル)ベンゼン

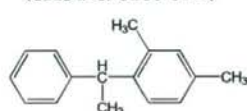
- ・1-2-ジメチル-4-(1-フェニルエチル)ベンゼン (CAS No. 6196-95-8)



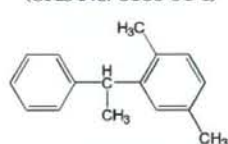
- ・1-2-ジメチル-3-(1-フェニルエチル)ベンゼン (CAS No. 81749-28-2)



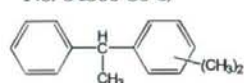
- ・1-3-ジメチル-4-(1-フェニルエチル)ベンゼン (CAS No. 6165-52-2)



- ・1-4-ジメチル-2-(1-フェニルエチル)ベンゼン (CAS No. 6165-51-1)



- ・上記4物質をまとめて ジメチル(1-フェニルエチル)ベンゼン (CAS No. 40766-31-2)
- ・エチル(1-フェニルエチル)ベンゼン (CAS No. 64800-83-5)



以下2つのうちいずれかの方法でカテゴリーアプローチを行いたいとの提案がなされた。

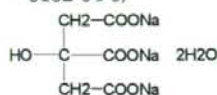
①6196-95-8の異性体でのカテゴリーアプローチ(SIDSデータからのリードアクロス)

②SAS-296製品固有のCAS No.を取得し、新CAS No.品としてJapan チャレンジに登録

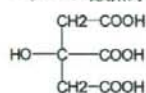
既存データの信頼性を確認した後に、費用の点も考慮して、選択すべき案を決定することとなった。

O. クエン酸三ナトリウム 二水和物

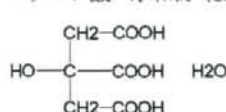
- ・クエン酸三ナトリウム 二水和物 (CAS No. 6132-04-3)



- ・クエン酸無水物 (CAS No. 77-92-9)



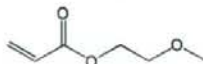
- ・クエン酸一水和物 (CAS No. 5919-29-1)



3物質(対象物質、クエン酸無水物及びクエン酸一水和物)のカテゴリーは妥当であると判断され、情報収集が行われる事になった。

P. メトキシエチルアクリレート

- ・2-メトキシエチル=アクリレート (MEA, CAS No. 3121-61-7)



MEA は、化学構造上で以下の2種類のカテゴリー一案が提示された。

アクリル酸エステル系カテゴリー

アルコキシエタノール系カテゴリー

検討の結果、アルコキシエタノール系カテゴリーが妥当と結論され、最終的に下記物質によるカテゴリーとなった。

- ・Acrylic Acid (CAS No. 79-10-7) [AA]
- ・Methyl Acrylate (CAS No. 96-33-3) [MA]
- ・Ethyl Acrylate (CAS No. 140-88-5) [EA]
- ・n-Butyl Acrylate (CAS No. 141-32-2) [BA]
- ・2-Methoxyethyl Acrylate (CAS No. 3121-61-7) [2-MTA]

Table 72 にマトリックス案を示す。

Q. イソフタル酸ジメチル

- ・Sodium dimethyl 5-sulphonatoisophthalate (SIPM) (CAS No. 3965-55-7)
- ・ナトリウム=3,5-ビス[(2-ヒドロキシエトキシ)カルボニル]ベンゼンスルホナートを主成分(50%以上)とする、ナトリウム=3,5-ビス(メトキシカルボニル)ベンゼンスルホナートとエチレン=グリコールの反応生成物 (SIPE) (CAS No. 無し)

・ Sodium hydrogen-5-sulphoisophthalate (SIPA) (CAS No. 6362-79-4)

SIPE の物理化学性状は SIPM, SIPA の試験結果を、生態毒性は SIPE, SIPA の試験結果をリードアクロスする事でカテゴリー化は可能である。

ヒト毒性については、SIPM の急性毒性試験と簡易生殖毒性試験を実施してリードアクロスする事となった。

Table 73 にマトリックス案を示す。

R. トリメトキシシラン

- ・ オルトケイ酸テトラメチル(TMS) (CAS No. 681-84-5)
- ・ トリメトキシシラン (TriMS) (CAS No. 2487-90-3)
- ・ テトラエトキシシラン (TES) (CAS No. 78-10-4)
- ・ ケイ酸四ナトリウム塩 水和物 (CAS No. 13472-30-5) [テトラメトキシシランの分解物]
- ・ Silicic acid, sodium salt (CAS No. 1344-09-8) [テトラメトキシシランの分解物]
- ・ Silicic Acid, Disodium salt (CAS No. 6834-92-0) [テトラメトキシシランの分解物]
- ・ メタノール (CAS No. 67-56-1) [テトラメトキシシランの分解物]

TMS, TriMS, TES は素早く分解して、ケイ酸四ナトリウム塩 水和物以下の物質に変化する。

カテゴリー化については、当初、TMS, TriMS, TES のみで行う事を考慮したが、TMS, TriMS, TES は素早く分解して、ケイ酸四ナトリウム塩 水和物以下の物質に変化することから、7物質でカテゴリー化が可能だとの結論に達した。Table 74 にマトリックス案を示す。

S. キシレン蒸留残渣油

- ・ キシレン蒸留残渣油 (CAS No. 93572-79-3) [類似構造物質からなる複合物質]

提案は、Japan チャレンジ物質の構成成分の混合物でされたカテゴリーを行いたいとの事であった。しかし、検討の結果、混合物での試験が妥当との意見があったが、最終的には行政としての判断を仰ぐ事となった。

T. 脂肪酸クロライド

B.脂肪酸クロライドに記載してあるように、脂肪酸クロライドは急速に分解し、塩酸と脂肪酸に分解する事から、分解物である脂肪酸と塩酸でカテゴリー

ーを組み、そこから一括して直鎖脂肪酸クロライドのカテゴリーを類推することの結論をうけ、対象化学物質である3つの脂肪酸クロライド、C8~C22の7つの脂肪酸、さらに塩酸でカテゴリー化の提案がされた。検討の結果、ヒト毒についてC8のオクタン酸について試験を実施してリードアクロスを行う事でカテゴリーは可能と判断された。Table 75 にマトリックスを示す。

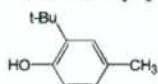
U. p[1]トルエンスルホン酸

- ・ p[1]トルエンスルホン酸・水和物(CAS No. 6192-52-5)
- ・ p[1]トルエンスルホン酸 (CAS No. 104-15-4)
- ・ p[1]トルエンスルホン酸ナトリウム (CAS No. 657-84-1)

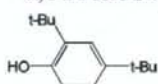
カテゴリー化については問題なしと結論された。Table 76 にマトリックスを示す。

V. 2-tert-ブチルクレゾール

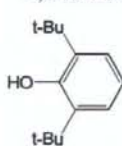
- ・ 2-tert-Butyl-p-cresol(CAS No. 2409-55-4)



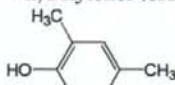
- ・ 2,4-Di-tert-butylphenol (CAS No. 96-76-4)



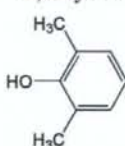
- ・ 2,6-tert-butylphenol (CAS No. 128-39-2)



- ・ 2,4-Xylenol (CAS No. 105-67-9)









- ・ 2,6-Xylenol (CAS No. 576-26-1)



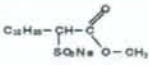
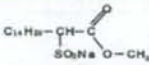
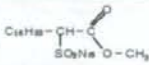
物理化学的性状、環境毒性においては上記物質でのカテゴリー化については問題がないが、ヒト毒に関しては、t-Butyl を一つまたは二つを持つ場合、評価するための合理性の説明が必要等からカテゴリーの再考が指摘された。

Table 63. t-ブチルメタクリラートのマトリックス案

テスト項目	必須 DATA	メタクリル酸エチル (EMA)	メタクリル酸イソブチル (iBMA)	メタクリル酸n-ブチル (nBMA)	メタクリル酸2-エチルヘキシル (EHMA)	メタクリル酸メチル (MMA)	メタクリル酸tert-ブチル (tBMA)
構造式							
CAS No.		97-63-2	97-86-9	97-88-1	688-84-6	80-62-6	585-07-9
分子量		114.2	142.2	142.2	198.1	101.1	142.2
物理化学性状							
融点	○	○	○	○	○	○	○
沸点	○	○	○	○	○	○	○
密度	○	○	○	○	○	○	○
蒸気圧	○	○	○	○	○	○	○
分配係数: n-オクタノール/水	○	○	○	○	○	○	○
水溶解度	○	○	○	○	○	○	○
解離定数	○	○	○	○	○	○	○
引火点	○	○	○	○	○	○	○
環境運命と経路							
安定性 光分解	○	○	○	○	○	○	○
安定性 水中安定性	○	○	○	○	○	○	○
分配経路を含む媒体間の移動と分配	○	○	○	○	○	○	○
環境モニタリングデータ	○	○	○	○	○	○	○
好気性生分解性	○	○	○	○	○	○	○
BOD/COD	○	○	○	○	○	○	○
生物濃縮	○	○	○	○	○	○	○
生態毒性							
急性毒性(魚類)	○	○	○	○	○	○	○ 試験実施
急性毒性(ミジンコ)	○	○	○	○	○	○	○ 試験実施
藻類への急性毒性	○	○	○	○	○	○	○ 試験実施
バクテリア等への急性毒性	○	○	○	○	○	○	○
水生生物への慢性毒性	○	○	○	○	○	○	○
陸生生物への毒性	○	○	○	○	○	○	○
ヒト健康毒性							
急性経口毒性	○	○	○	○	○	○	○
急性吸入毒性	○	○	○	○	○	○	○
急性経皮毒性	○	○	○	○	○	○	○
反復投与毒性	○	○	○	○	○	○	○
遺伝毒性in vitro遺伝子突然変異	○	○	○	○	○	○	○ 陰性
遺伝毒性in vitro染色体異常	○	○	○	○	○	○	○ 陽性
遺伝毒性 その他	○	○	○	○	○	○	○
発癌性	○	○	○	○	○	○	○
受胎能	○	○	○	○	○	○	○ 試験実施
発生毒性	○	○	○	○	○	○	○ 試験実施
皮膚刺激性/腐食性	○	○	○	○	○	○	○
皮膚感作性	○	○	○	○	○	○	○
人暴露の情報	○	○	○	○	○	○	○

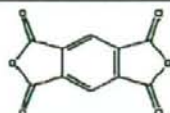

○:データ取得

Table 64. 脂肪酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩のマトリクス案

テスト項目	必須 DATA	C14-MES	C16-MES	C18-MES
構造式				
CAS No.		4016-22-2	4016-24-4	4062-78-6
分子量		344.444	386.523	400.55
物理化学性状				
融点	○	○	○	
沸点	○	○	○	
密度		○	○	○
蒸気圧	○	○	○	
分配係数: n-オクタンール/水	○	○	○	○
水溶解度	○	○	○	
解離定数	○			
引火点				
環境運命と経路				
安定性 光分解	○	○	○	○
安定性 水中安定性	○		○	
分配経路を含む媒体間の移動と分配	○			
環境モニタリングデータ		○	○	
好気性生分解性	○	○	○	○
BOD/COD				○
生物濃縮		○	○	
生態毒性				
急性毒性(魚類)	○	○	○	○
急性毒性(シロ)	○	○	○	
藻類への急性毒性	○	○		
バクテリア等への急性毒性				
水生生物への慢性毒性		○	○	
陸生生物への毒性				
ヒト健康毒性				
急性経口毒性	○	○	○	RA
急性吸入毒性	○			
急性経皮毒性	○			
反復投与毒性	○	○	○	RA
遺伝毒性in vitro遺伝子突然変異	○	○	○	RA
遺伝毒性in vitro染色体異常	○	○	○	RA
遺伝毒性 その他				
発癌性				
受胎能	○	○	○	RA
発生毒性	○	○	○	RA
皮膚刺激性/腐食性		○	○	RA
皮膚感作性		○	○	RA
人暴露の情報				

○:データ取得 RA:リードアコース

Table 65. 無水ピロメリット酸のマトリックス案

テスト項目	必須 DATA	無水ピロメリット酸	ピロメリット酸
構造式			
CAS No.		89-32-7	89-05-4
分子量		218.1	254.2
物理化学性状			
融点	○	RA	試験実施
沸点	○	RA	試験実施
密度			
蒸気圧	○	RA	試験実施
分配係数: n-オクタノール/水	○	RA	試験実施
水溶解度	○	RA	○
解離定数	○		
引火点			
環境運命と経路			
安定性 光分解	○	○	○
安定性 水中安定性	○	○	○
分配経路を含む媒体間の移動と分配	○	○	○
環境モニタリングデータ			
好気性生分解性	○	○	○
BOD/COD			
生物濃縮			
生態毒性			
急性毒性(魚類)	○	○	試験実施
急性毒性(ミシコ)	○	○	試験実施
藻類への急性毒性	○	○	試験実施
バクテリア等への急性毒性			
水生生物への慢性毒性			
陸生生物への毒性			
ヒト健康毒性			
急性経口毒性	○	RA	試験実施
急性吸入毒性	○		
急性経皮毒性	○		
反復投与毒性	○	RA	試験実施
遺伝毒性in vitro遺伝子突然変異	○	RA	試験実施
遺伝毒性in vitro染色体異常	○	RA	試験実施
遺伝毒性 その他			
発癌性			
受胎能	○	RA	試験実施
発生毒性	○	RA	試験実施
皮膚刺激性/腐食性			
皮膚感作性			
人暴露の情報			

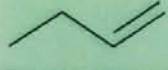





○: データ取得 RA: リードアクト

Table 66. シュウ酸二水和物のマトリックス案

テスト項目	必須 DATA	シュウ酸二水和物	シュウ酸
構造式		$\begin{array}{c} \text{COOH} \\ \\ \text{COOH} \end{array} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	$\begin{array}{c} \text{COOH} \\ \\ \text{COOH} \end{array}$
CAS No.		6153-56-6	144-62-7
分子量			
物理化学性状			
融点	○	○	○
沸点	○	○	○
密度		○	○
蒸気圧	○	○	○
分配係数: n-オクタノール/水	○	○	○
水溶解度	○	○	○
解離定数	○	○	
引火点			
環境運命と経路			
安定性 光分解	○	RA	試験実施
安定性 水中安定性	○	RA	試験実施
分配経路を含む媒体間の移動と分配	○	RA	試験実施
環境モニタリングデータ			
好気性生分解性	○	RA	試験実施
BOD/COD			
生物濃縮			
生態毒性			
急性毒性(魚類)	○	RA	○
急性毒性(ミシコ)	○	RA	○
藻類への急性毒性	○	RA	○
バクテリア等への急性毒性			
水生生物への慢性毒性			
陸生生物への毒性			
ヒト健康毒性			
急性経口毒性	○	○	○
急性吸入毒性	○		
急性経皮毒性	○	○	○
反復投与毒性	○		試験実施
遺伝毒性in vitro遺伝子突然変異	○		○
遺伝毒性in vitro染色体異常	○		試験実施
遺伝毒性 その他			
発癌性			○
受胎能	○	RA	○
発生毒性	○	RA	○
皮膚刺激性/腐食性			
皮膚感受性			
人暴露の情報			





○: データ取得 RA: リードアックス

Table 67. 2-ペンテンのマトリックス案

	C4H8 Butene	C5H10 Pentene	C6H12 Hexene
1-ene	1-Butene	1-Pentene	1-Hexene
	106-98-9	109-67-1	592-41-6
	CH ₂ =CH-CH ₂ -CH ₃	CH ₂ =CH-(CH ₂) ₂ -CH ₃	CH ₂ =CH-(CH ₂) ₃ -CH ₃
	US-HPV Low 1,3-Butadiene C4 Category 2001	OECD-HPV C5 Non-Cyclics Category(に一部情報あり)	OECD-SIDS Alpha-Olefin (SIDS- Dossier: 1-Hexene)
			
2-ene	2-Butene	2-Pentene	2-Hexene
	107-01-7	109-68-2	592-43-8
	CH ₃ -CH=CH-CH ₃	CH ₃ -CH=CH-CH ₂ -CH ₃	CH ₃ -CH=CH-(CH ₂) ₂ -CH ₃
	OECD-SIDS 2-Butene		OECD-SIDS Higher Olefin Category (に一部情報あり)
			
Mixture	Butene	Pentene	Hexene
	25167-67-3	25377-72-4	25264-93-1
	OECD-SIDS Butenes		OECD-SIDS SIAM19 Higher Olefin- Category

 OECD評価済
 US-HPV評価済

Table 68. A-POとE-POのマトリックス案

テスト項目	必須 DATA	A-PO2	A-PO5	E-PO2	E-PO5
構造式					
CAS No.		116-37-0	37353-75-6	901-44-0	32492-61-8
分子量		344 (平均)	518 (平均)	316 (平均)	448 (平均)
融点	○	試験実施	試験実施	試験実施	試験実施
沸点	○	試験実施	試験実施	試験実施	試験実施
密度	○	試験実施	試験実施	試験実施	試験実施
蒸気圧	○	試験実施	試験実施	試験実施	試験実施
分配係数: n-オクタン/水	○	試験実施	試験実施	試験実施	試験実施
水溶解度	○	試験実施	試験実施	試験実施	試験実施
解離定数	○	試験実施	試験実施	試験実施	試験実施
引火点	○	試験実施	試験実施	試験実施	試験実施
安定性	○	○	○	○	○
光分解	○	○	○	○	○
水中安定性	○	○	○	○	○
分配係数を含む媒体間の移動と分配	○	○	○	○	○
物理-生物パラメータ	○	○	○	○	○
好気性生分解性	○	○	○	○	○
BOD/COD	○	○	○	○	○
生物濃縮	○	○	○	○	○
急性毒性(魚類)	○	○	○	○	○
急性毒性(シジメ)	○	○	○	○	○
藻類への急性毒性	○	○	○	○	○
小動物への急性毒性	○	○	○	○	○
水生生物への慢性毒性	○	○	○	○	○
陸生生物への毒性	○	○	○	○	○
急性経口毒性	○	○	○	○	○
急性吸入毒性	○	○	○	○	○
急性経皮毒性	○	○	○	○	○
反復投与毒性	○	○	○	○	○
遺伝毒性in vitro遺伝子突変	○	○	○	○	○
遺伝毒性in vitro染色体異常	○	○	○	○	○
遺伝毒性 その他	○	○	○	○	○
発癌性	○	○	○	○	○
変胎能	○	○	○	○	○
発生素性	○	○	○	○	○
皮膚刺激性/腐食性	○	○	○	○	○
皮膚感作性	○	○	○	○	○
人畜薬の情報	○	○	○	○	○






○:データ取得

Table 69. シュウ酸二水和物のマトリックス案

テスト項目	必須 DATA	グリシン	グリシナトリウム
構造式		H_2N-CH_2-COOH	$H_2N-CH_2-COONa$
CAS No.		56-40-6	6000-44-8
分子量		75.07	97.05
物理化学性状			
融点	○	○	○
沸点	○	○	○
密度			
蒸気圧	○	○	○
分配係数: n-オクタノール/水	○	○	○
水溶解度	○	○	RA
解離定数	○	○	RA
引火点			
環境運命と経路			
安定性 光分解	○	○	○
安定性 水中安定性	○	○	○
分配経路を含む媒体間の 移動と分配	○	○	○
環境モニタリングデータ			
好気性生分解性	○	○	○
BOD/COD			
生物濃縮			
生態毒性			
急性毒性(魚類)	○	○	RA
急性毒性(ミジンコ)	○	○	RA
藻類への急性毒性	○	○	RA
バクテリア等への急性毒性			
水生生物への慢性毒性			
陸生生物への毒性			
ヒト健康毒性			
急性経口毒性	○	○	○
急性吸入毒性	○		
急性経皮毒性	○		
反復投与毒性	○	○	RA
遺伝毒性in vitro遺伝子突 然変異	○	○	RA
遺伝毒性in vitro染色体異 常	○	○	RA
遺伝毒性 その他			
発癌性		○	RA
受胎能	○	○	RA
発生毒性	○	○	RA
皮膚刺激性/腐食性			
皮膚感受性			
人暴露の情報			







○:データ取得 RA:リードアクロス

Table 70. t-ブチルニメタクリラートのマトリックス表

テスト項目	必須 DATA	HCFC-225ca	HCFC-225cb	市販製品	HCFC-123	HCFC-124	HCFC-125
構造式							
CAS No.		422.56-0	507-55-1		306-83-2	2837-89-0	354-33-6
分子重		202.9	202.9		152.9	136.5	120.0
融点	○	○	○		○	○	○
沸点	○	○	○		○	○	○
密度	○	○	○		○	○	○
蒸気圧	○	○	○		○	○	○
分配係数: n-オクタン/水	○	○	○		○	○	○
水溶解度	○	○	○		○	○	○
解離定数	○	○	○		○	○	○
引火点							
安定性 光分解	○						
安定性 水中安定性	○						
分配経路を含む媒体間の 移動と分配	○						
環境モニタリングデータ							
好気性生分解性	○	○	○		○	○	○
BOD/COD							
生物濃縮							
急性毒性(蒸気)	○	○	○		○	○	○
急性毒性(シノコ)	○	○	○		○	○	○
蒸気への急性毒性	○	○	○		○	○	○
ハザード等への急性毒性							
水生生物への慢性毒性							
陸生生物への毒性							
急性経口毒性	○	○	○		○	○	○
急性吸入毒性	○	○	○		○	○	○
急性経皮毒性	○	○	○		○	○	○
反復投与毒性	○	○	○		○	○	○
遺伝毒性in vitro	○	○	○		○	○	○
遺伝毒性in vitro染色体異常	○	○	○		○	○	○
遺伝毒性 その他	○	○	○		○	○	○
発癌性	○	○	○		○	○	○
変胎能性	○	○	○		○	○	○
発生源性	○	○	○		○	○	○
皮膚刺激性/腐食性	○	○	○		○	○	○
皮膚腐食性	○	○	○		○	○	○
人暴露の情報							

○:データ取得

Table 71. ピグメントイエロー14のマトリックス案

テスト項目	必須 DATA	Pigment Yellow 14	Pigment Yellow 55	Pigment Yellow 17	Pigment Yellow 12	Pigment Yellow 13	Pigment Yellow 83
構造式							
CAS No.		6358-37-8	6358-37-8	4351-49-1	6358-85-6	5102-83-0	5567-15-7
分子式							
物理化学性状							
融点	○				○		○
沸点	○				○		○
密度							
蒸気圧	○				○		○
分配係数 n-オクタノール/水	○				○		○
水溶解度	○				○		○
閃火点	○				○		○
環境運命と経路							
安定性 光分解	○				○		○
安定性 水中安定性	○						
分配経路を含む媒体間の移動と分配	○				○		○
環境ニルカゲータ	○				○		○
好気性生分解性	○				○		○
BOD/COD							
生物濃縮	○						
生態毒性							
急性毒性(魚類)	○				○		
急性毒性(シロコ)	○						
薬劑への急性毒性	○						
ハゲリワ等への急性毒性							
水生生物への慢性毒性							
陸生生物への毒性							
ヒト健康毒性							
急性経口毒性	○				○		○
急性吸入毒性	○						
急性経皮毒性	○				○		○
区別疫学毒性							
遺伝毒性in vitro	○				○		○
遺伝毒性in vivo	○						
遺伝毒性in vitro染色体異常	○						
遺伝毒性 その他							
発がん性							
発生源性	○						
皮膚刺激性/腐食性	○						
皮膚感受性							
人暴露の情報							

○:データ取得

Table 72. メキシエチルアクリラートのマトリックス案

テスト項目	必須 DATA	AA	MA	EA	BA	2-MTA
構造式						
CAS No.		79-10-7	96-33-3	140-88-5	141-32-2	3121-61-7
分子量		72.06	86.09	100.12	128.17	130.14
物理化学性状						
融点	○	○	○	○	○	○
沸点	○	○	○	○	○	○
密度						
蒸気圧	○	○	○	○	○	○
分配係数: n-オクタノール/水	○	○	○	○	○	○
水溶解度	○	○	○	○	○	○
解離定数	○	○	○	○	○	○
引火点						
環境運命と経路						
安定性 光分解	○	○	計算値	計算値		
安定性 水中安定性	○	○	○	○		
分配経路を含む媒体間の移動と分配	○	計算値	計算値	計算値		
環境モニタリングデータ						
好気性生分解性	○	○	○	○		
BOD/COD						
生物濃縮			○			
生態毒性						
急性毒性(魚類)	○				○	
急性毒性(ミシコ)	○					
藻類への急性毒性	○					
バクテリア等への急性毒性						
水生生物への慢性毒性						
陸生生物への毒性						
ヒト健康毒性						
急性経口毒性	○	○		○	○	○
急性吸入毒性	○					○
急性経皮毒性	○					○
反復投与毒性	○	○			○	○
遺伝毒性in vitro遺伝子突然変異	○	○			○	○
遺伝毒性in vitro染色体異常	○	○			○	
遺伝毒性 その他						
発癌性					○	
受胎能	○	試験実施			○	
発生毒性	○	試験実施			○	
皮膚刺激性/腐食性						
皮膚感作性						
人暴露の情報						

○: データ取得