

## 第3章：データ評価

### 3.1 SIDS Dossier用データの質判定の手引き：(信頼性、妥当性、十分性)<sup>1</sup>

#### 3.1.1 緒言

1. OECD 高生産量化学物質リスト掲載の化学物質は約 5000 種ある (最終更新 2004 年)。OECD HPV 化学物質点検プログラムは、化学物質の人間の健康および環境への有害性の初期評価を行うものである。
2. HPV 化学物質点検の第 1 ステップは、スクリーニング用情報データセット (Screening Information Data Set ; SIDS) を構成する各項目について、質の良好な十分量の情報があることを確認するために情報を収集しレビューを行うことである。いかなる HPV 化学物質についても、追加試験が必要かどうかを決定する前にこれを実施する必要がある。
3. 本文書の目的は、SIDS データ項目 (SIDS data element) の充足に既存データが十分であるか否かを最終的に判断するプロセスの第 1 ステップにおいて、業界、政府、その他の関係者に基本的な手引きを提供することである。
4. 本文書はデータの質の評価に利用できると考えられるあらゆるアプローチを示すものではなく、2 つのツールのみを提示する。1 つは既に業界で用いられているものであり、もう 1 つは政府提案のもので、HPV 化学物質に関するスクリーニング用情報データセット (SIDS) の収集および完全性評価のための基準重視型アプローチである。

#### 3.1.2 スクリーニング用情報データセット (Screening Information Data Set ; SIDS)

5. SIDS は、HPV 化学物質の初期有害性評価を行うために用いられ、潜在的な人間の健康および環境への有害性と追加試験の必要性の勧告について結論を出す根拠となるものである。
6. SIDS の作成にあたって、OECD は、SIDS 項目の新データ生成のための推奨試験法を確立するため、OECD 化学品テストガイドラインを最大限利用した。OECD 化学品テストガイドラインと OECD GLP 原則 (OECD Principles of Good Laboratory Practice) の利用により、新たに生成されたあらゆる試験データは OECD の Mutual Acceptance of Data (MAD) 方式[C(81)30 (最終版)を参照]のもとで確実に受理されることが保証される。この方式に基づいて生成されたデータは評価目的で各国に受理され、繰り返し試験を実施する必要はない。
7. HPV 化学物質について入手可能な既存情報の全てを検討することが重要である。なぜなら、質が十分であると判断されれば、当該 SIDS 項目について追加試験は不要であり、時間・費用および実験動物等の資源の節約になるからである。

<sup>1</sup> 本文書は、2004 年 12 月までに OECD 既存化学物質プログラム (OECD Existing Chemicals Programme) でなされた合意に基づき、OECD 事務局 (Secretariat) が作成したものである。

### 3.1.3 既存データの質

8. 既存データの質を判定するプロセスでは、ある SIDS 項目を説明するために入手可能な情報の十分性、信頼性、および妥当性という 3 側面を検討する。これらの用語は、下記の方針に沿って Klimisch et al. (1997)が定義したものである：
- ・ **信頼性** – 試験方法（標準化された方法が望ましい）および実験手順や結果の記載方法について試験報告書や刊行物の本来的な質を評価し、知見の明瞭性および妥当性（plausibility）の証拠とする。
  - ・ **妥当性** – データや試験が特定の有害性の特定およびリスク特定にどの程度適切であるか。
  - ・ **十分性** - 有害性/リスク評価を目的とした場合のデータの有用性を定義する。各 SIDS 項目について複数の試験が存在する場合は、信頼性と妥当性が最も高い試験に最大の重みが置かれる。もっとも質の高い試験、すなわちキースタディについては Robust Study Summary が作成される。
9. この手引きは、データの信頼性の判定を第一に取り扱う。これは当該試験がどのように実施されたかに本質的に関係している。この情報は、Robust Study Summaries 作成を可能にするうえで必要であり、これを実施した後に妥当性・十分性の検討が可能となる。
10. Robust Study Summary を完成させるには、試験、方法、結果報告、導き出された結論、および結果の質を慎重に検討しなければならない。
11. 既存データの質が変動する原因は複数ある。Klimisch et al, 1997 は、下記の事項を示唆している：
- 異なる化学品テストガイドラインの使用（現在の標準ガイドラインと比較して）；
  - 被験物質の正しいキャラクタリゼーションができない（純度、物性性状等に関して）；
  - 未完成な手法／手順が使用され、その後改良がなされた；
  - あるエンドポイントについて特定の情報が記録されていない（または測定されてさえいない）可能性はあるが、その後その情報が重要であると認識されたという事実。
12. HPV 化学物質についてデータギャップが存在するかどうかを評価する際の第 1 ステップは、文献検索を行い、しかるべき場合には企業記録検索を行うことである。次に、追加試験が必要かどうかを決定するために、検索で特定された既存データのレビューを実施する必要がある。
13. 追加試験の必要性の特定は、下記のデータ収集およびレビュープロセスのあらゆる段階で検討が必要になる可能性がある：
- a) 当該データの質の初期決定段階；
  - b) 各 SIDS 項目について妥当性および信頼性が最も高い試験の Robust Study Summary を作成する段階；
  - c) 必要であれば、試験計画の作成段階。
14. 点検中の物質のタイプによっては、実施困難または実施が適切でない特定の項目に関して SIDS 試験が勧告される場合もある（例えば、非生物系または生物系で不安定な化学物質、爆発性／可燃性が既知の化学物質または揮発性化学物質）。このような場合には、試験の妥当性が疑わしいこともある。
15. 各試験は基本的にケースバイケースで検討する必要があるが、このような理由から各試験の信頼性をざっと見ておくと、後で妥当性・十分性を検討する際に時間の節約になることがある。SIDS 初期評

価を目的とした妥当性・十分性の決定に進む前に、また **Robust Study Summary** 作成に進む前に、当該試験の信頼性について少なくとも最小限の情報が既知である必要がある。そのために、下記の手引きで、初期フィルターつまり第 1 フィルターとして使用できる整合性のあるアプローチを 2 種類提供する。

### 3.1.4 信頼性初期フィルター

16. データの信頼性は重要な初期検討事項である。これは比較的速やかに実施でき、信頼性の低い試験をふるい落として信頼性が最も高いと考えられる試験に資源を集中投入できる。試験が実施された方法についての知識がないと、他の検討が全て妥当でなくなる可能性がある。信頼性のないデータを取り除くため、試験報告の初期スクリーニングを支援する目的で、2つのアプローチが提案されている。これらは両立するので、SIDS Dossier の収集とデータの質検討の担当者は、これらを単独で使用しても併用しても良い。
17. アプローチの 1 つは、Klimisch et al. (1997) により開発された。このアプローチは、特に生態毒性試験と健康への影響試験について信頼性をスコア化する方法として開発されたが、物理化学性状試験および環境中運命・経路試験にも拡大適用できる。もう 1 つのアプローチは、1998 年に US EPA HPV チャレンジプログラムの一環として開発された。
18. Klimisch et al. (1997) は、試験の信頼性分類に使える下記のようなスコア化方式を開発した。
  - 1 = **信頼性あり（無制限）**： 全般的に妥当および／または国際的に受け入れられているテストガイドラインに従って生成された（できれば GLP に従って実施されていることが望ましい）試験またはデータ、または記載されている試験パラメーターが特定の（国内）テストガイドラインに基づいている...または記載されている全パラメーターがガイドライン試験法と密接に関連しているまたは同等である試験またはデータ。」
  - 2 = **信頼性あり（制限付き）**： 「記載されている試験パラメーターは特定のテストガイドラインに完全には準拠していないが、当該データを受け入れるには十分である、或いはテストガイドラインに含めることはできないが詳細に記載されており科学的に容認できる調査結果が記載されている（殆どの場合、GLP に準拠して実施されていない）試験またはデータ。」
  - 3 = **信頼性なし**： 「測定系と被験物質の間に干渉があった、または当該暴露に関して妥当性のない生物／試験系が使用された（例えば、生理学的でない投与経路）、或いは受け入れられない方法に従って実施または生成され、その記載が評価に十分ではなく、専門家が判断する上でも説得力がない試験またはデータ。」
  - 4 = **分類不能**： 「実験の詳細が十分に示されておらず、短い要約または二次文献（書籍、レビュー等）に羅列されているだけの試験またはデータ」。
19. Klimisch コードを使用すると、後のレビューのために試験を整理するのに役立つツールが得られる。例えば、試験のレビュー担当者は、最初に最も信頼性の高い試験に集中でき、その後信頼性の高い試験のみの妥当性・十分性の検討に時間をかけられる。基本的な信頼性基準に適合しなかった試験は最初に除外される。SIDS Dossier 中の特定の試験に関する情報に Klimisch スコアを追加する準備がなされている [SIDS Dossier 用 Robust Study Summary 作成の手引きについては、付属文書 1 を参照]。
20. US EPA 方式によって開発された第 2 のアプローチは、SIDS Dossier を構成する各タイプのデータについて、主要な信頼性基準を説明することにより、Klimisch 方式よりも多くの情報を提供する（表

1)。それらの基準は、試験における情報の全体的な科学的完全性と妥当性、即ち信頼性を規定するものである。このアプローチはKlimisch方式と矛盾しない。表 1の基準に適合しない試験はいずれも、Klimisch方式でも分類不能となるであろう。しかし、そうした試験は、あるSIDS項目の全体評価の際に、後で補足情報として検討される場合もある（特に単一のキースタディが存在しない場合）。

### 3.1.5 妥当性および十分性の決定

21. 論理的な科学的判断を用いることは、妥当性・十分性の検討時に最も重要な原則である。初期フィルターを通過した試験は、SIDS データ項目の評価と Robust Study Summary の収集に使用される手引きを用いて検討されるべきである [SIDS Dossier 用 Robust Study Summary 作成の手引きを参照]。これらの文書は、当該試験が SIDS 初期評価用に妥当かつ十分であるとみなされるために入手可能でなければならない情報の側面に焦点を当てるものである。この段階で、特定の SIDS 項目を最も良く表すとともに Robust Study Summary が作成可能かどうかを示す 1 つ以上のキースタディが特定されることが期待される。
22. 妥当性・十分性をより詳細に評価することは、SIDS Dossier の作成に非常に大きく関わる（しかるべき場合には Robust Study Summaries の作成を含む）。従って、これは、第 2 段階の検討と見なすことができる。

### 3.1.6 証拠の重み (Weight-of-the-Evidence) 分析

23. Robust Study Summaries 作成のために、信頼性がある妥当かつ十分なデータを特定するツールを使用することは、OECD HPV 化学物質点検プログラムにおける質の高いデータの使用を保証する一助となる。しかし、そうしたツールは、このデータを評価する際の証拠の重み (weight-of-evidence) 分析の必要性を排除するものではない。
24. 同様に、データの信頼性に関する Klimisch コードが割り当てられたからといって、初期評価全体においてそうした試験を特別に重視すべきであるということには必ずしもならない。なぜなら、他項目に関する他の試験から、影響を及ぼす情報が得られる場合があるからである。HPV 化学物質点検プログラムのために作成された文書は、単にスコアについて言及するのではなく、質の評価に用いられた基準を明示する必要がある。
25. SIDS の範疇を超える様々な試験（例えば、神経毒性、魚類慢性毒性等）は実施されているが、SIDS エンドポイント用の試験は実施されていない HPV 化学物質もある。このような場合、当該 SIDS 項目がそうした非 SIDS 項目試験で十分に説明されることを証明する理論的根拠を提示できれば、その特定エンドポイントの試験を新たに行う必要はない。
26. 既存データの性質を考えた場合、複数の試験—そのうちの一部は初期フィルターを通過しなかった可能性がある—を併用してその項目を充足させ、それによって追加試験を回避できる場合も（特定の SIDS 項目については）あると期待することは妥当である。
27. 証拠の重み分析が実施可能な別の方法に、適切でない試験が 1 試験以上含まれる複数の試験を組み合わせ、特定の SIDS 項目の充足のために用いることが挙げられる。例えば、特定の化学物質について入手可能な反復投与試験が複数存在するが、どの試験もそれ自体では何らかの欠陥がある（即ち、試験動物数/投与群数が少ない、対照群以外の投与群が 1 群のみである、試験途中で投与量や投与頻度に変更がある等）ために受け入れられない場合がある。しかし、全体ではそれら各種の試験は大体同一の用量と時点で同一標的器官に影響を示している。そのことで SIDS の反復投与毒性デ

一タ項目は充足されると考えられる。

表 1：データの信頼性の初期スクリーニング基準（SIDS 情報項目タイプ別）

基 準	下記の SIDS 情報項目に必要な		
	物理化学 性状	環境中運命	生態毒性/ 健康
被験物質の特定 (化学的純度および不純物の特定/定量化を含む、被験物質に ついての入手可能な範囲における適切な説明)	X	X	X
温度	X <sup>1</sup>	X	X
参考文献/引用の全詳細	X	X	X
対照群 <sup>2</sup>		X	X
統計 一部例外あり (例えば、 <i>Salmonella</i> /エームズ試験)			X
生物の種、系統 (株)、個体数、性別および年齢			X
用量/濃度レベル		X	X
暴露の経路/タイプ <sup>3</sup>			X
暴露期間		X	X

表 1 の脚注

1. 蒸気圧、オクタノール/水分配係数、および水への溶解度の値。
2. 全ての試験について陰性対照群が必要で、一部の試験 (例えば、生分解性、*Salmonella*/エームズ試験) については陽性対照群もなければならない。被験物質の投与に溶媒が使用される場合は、溶媒対照の設定と報告が必要である。ただし急性哺乳動物毒性試験については例外が認められる。
3. 暴露の経路/タイプ (例えば、哺乳動物試験の経口吸入等) や試験系 (生態毒性について止水式か流水式か等) は報告されなければならない。

### 3.1.7 物理化学性状エンドポイントに関する二次データ源の利用

28. OECD HPV 化学物質点検プログラムへの提案時に SIDS エンドポイントに関して最も関心がもたれることは、それらのエンドポイントが正確かつ信頼性があり有効 (valid) であるべきだということである。環境中暴露の予測と生態毒性試験データの解釈に必要な、オクタノール-水分配係数、水への溶解度、および蒸気圧等のパラメーターについて正確な値が確定されていることが特に重要である。
29. 2.4.3 項で詳細に説明されているとおり、データの信頼性はRobust Study Summaryの作成によって実証される。これは、被験物質の識別情報、測定に用いられた方法、およびこれがGLP基準に従って実施されたか否か等の情報を提供する。この情報を得るためには、理想的には、既発表の論文や試験報告等の一次データ源を参照することが望ましい<sup>2</sup>。2.2.3 項では、既存SIDSデータについて、「可能な限り、刊行物原本を入手することが望ましい」と明記している。
30. しかし、十分に試験された化学物質の場合には、標準的な参考文献等の信頼できる二次情報源から得られる物理化学性状パラメーターの値を用いることが容認可能な場合がある。このようなデータは、「ピアレビューされた」データ、即ち入手可能な文献に記載されたデータが精密に評価され、しかるべき信頼できる値が選択されていることが周知であることが条件となる。信頼性を考える場合、ピアレビューがなされたこうしたデータ源は、様々なデータ源が参照され、試験方法や被験物質の識別情報が評価され、エンドポイントについて信頼できる代表値が選択されたことが前提になっているので、信頼性コードの(2)「妥当性あり (制限付き)」に割り当てるのが適当である。このようなレビュープロセスが実施されたかどうかは、ハンドブックの緒言に明記されているか、オンラインデータベースのサマリー情報に含まれていることが望ましい。
31. ピアレビューされた物理化学性状データを含む有用な参考書籍とデータ集 (一部は 2.2.3 項に収載) として次のものがある：
- The Merck Index ;
  - The CRC Handbook of Chemistry and Physics ;
  - The IUPAC Solubility Data Series ;
  - Beilstein Database
  - Illustrated Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals.
32. SRC PhysProp Database<sup>3</sup>およびTOXNETネットワーク上のHSDB<sup>4</sup>等のオンラインデータベースは良い情報源であり、大体において選択された値の参考文献が示されている。これらのデータベース情報源は、たいていそれら自体は二次データ源であるので、データベースを直接引用する (つまり最初のデータ源を検索しないで二次データ源を引用する) のではなく、オリジナルのデータ源を確認し参照することが望ましい。このようなデータベースは貴重な資源であるが、データを入手可能な場所を確認するための情報源として利用すべきである。

<sup>2</sup> オリジナルのデータ源が「古い」文献であれば、下記の事項を考慮する必要がある：(1)当該文献の出版が20年以上前のものであれば、その入手には時間がかかるか入手不可能であることもある；(2)現行GLP基準に準拠していない可能性がある；(3)古い文献であるほど、純度を含む被験物質に関する情報が定型的に提供されていない可能性がある。

<sup>3</sup> <http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm>でオンライン入手が可能。これらのデータは、EPIWINソフトウェアパッケージの「Experimental Database (実験データベース)」作成にも使用されている。

<sup>4</sup> Hazardous Substances Data Bankは、<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>にてTOXNET経由でオンライン入手が可能。

33. 「データの再利用」とそれが環境評価用データの信頼性を低下させる可能性があることについては、学界で懸念が高まっている問題であり<sup>5</sup>、ベストプラクティスとして一次データ源からRobust Study Summary (RSS) を作成する必要性が高まっている。
34. 二次データ源からのみデータを利用する際には、SIDSデータセット用に適切なデータが選択されたことを証明するために「証拠の重み」アプローチ (3.1.6 項を参照) を構築することが必須である。ピアレビューされた二次データ源のみを他の裏付けデータなしで用いることは通常は受け入れられない。SIDS Dossierは、上述したような複数の信頼できるデータ源から採られた数値を、製造データ、信頼できるQSAR予測値<sup>6</sup>、および/またはピアレビューされていない可能性のある情報源からのデータ (例えば、Vershueren's Handbook on Environmental Data) 等の裏付けデータと共に提示することが望ましい。化学物質等安全性データシート(MSDS)および企業が提供する他のあらゆる技術資料から採られた物理化学性状の値は、RSSを作成でき当該試験の信頼性評価を独立して行えるよう実験方法や被験物質等の詳細情報が提供されない限り、信頼性ランク(4)「分類不能」にしか割り当てられない。
35. 二次データ源からとられた蒸気圧、Log Kow、および水への溶解度等の物理化学性状パラメーターの値を提示する際に、入手可能なら詳細に記載すべき重要要因として、次のようなことがある：その値は実測値か推定値か。実験的定量方法または推定方法<sup>7</sup>；測定または推定が行われた温度；および参考文献/引用の詳細。これがハンドブックやデータ集の中で明確でない場合には、値が実験的定量値であれ推定値であれ、一次データ源を参照することが望ましい。
36. 物理化学性状データのデータ源として使用頻度が最も高いものについて主要なコメントを一部下記の表 2 に示す。しかし、個々のパラメーターの各データ源の信頼性に関して総合的な結論を引き出すのは困難であり、レビュー担当者は第 2 章および第 3 章に従い、被験物質の識別情報、試験方法、および試験結果の信頼性を保証すべく、あらゆる努力をすべきであることが強調されなければならない。

表 2：物理化学性状データについて広く用いられているデータ源

物理化学性状データ源	コメント
Merck Index	物理性状データは文献通りに引用されている。文献中に複数択一的なデータが現れる場合には、データは評価され代表値が選ばれている。その上で対応するデータ源と共に値が報告されている。
Hawley's Condensed Chemical Dictionary	本書は「信頼できる」と見なされる物理性状データの概要である；「記載値が不完全である場合は、使用された参考文献系では信頼できるデータが得られなかったと考えるよい」[値の参考文献は提示されていない]

<sup>5</sup> Renner R (2002) The Kow Controversy. Environmental, Science and Technology, v36, no.21, pp. 411A-413Aを参照。

<sup>6</sup> 値の推定に用いたQSARが検討されている化学物質タイプに対して適当であることが証明されるべきである (3.3 項を参照)。QSAR計算によって算出された推定値が実測値とかなり異なる場合には、適用されたQSARが適当であったかどうか、或いは使用されているモデルに関して証明/検証された領域内で推定が行われているかどうか等、差異について若干の考察が必要である。

<sup>7</sup> 使用された方法が、検討されている特定の被験物質に対して適当であることが重要である。

CRC Handbook of a Chemistry and Physics	物理定数は、データ集や一次文献を含む多数のデータ源から採られている。不一致が認められた場合には、信頼性が最も高いと思われる値が選択された。[文献源は溶解度や Log Kow 等の選択された性状について示されている；これらの文献は一般に信頼できるデータ集である。]
IUPAC Solubility Data Series	The Solubility Data Series は、国際純正応用化学連合 (International Union of Pure and Applied Chemistry ; IUPAC) のプロジェクトである。このシリーズの刊行は、気体、液体、固体を含む全ての物理系における溶解度の包括的かつ決定的なデータ集の提供を目指して 1979 年に始まった。
Beilstein Database <sup>8</sup>	Beilstein の有機物質の記録は、精密にレビューされ評価された、Beilstein Handbook of Chemistry に由来する文書、および 1779 年から現在までに及ぶ有機化学分野の主要 176 誌から取られたデータを含む。[数値と一次参考文献の網羅的リストが提供されている]。
Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals (Mackay et al)	融点・沸点等の物理性状は、よく利用されるハンドブックから採られている。溶解度、蒸気圧、Log Kow 等の他の物理性状は一次参考文献源から採られている。これらの各性状については広範な参考値が報告されている。データは評価済みであり、精選された「最善値」が各性状について示され、環境中分布計算に用いられる。
SRC PhysProp Database/ EPIWN Experimental Database	データが豊富な化合物については、データ評価が行われていて信頼できる値を既に選択しているデータベースから値が採られている。データが少ない化合物については、データ源の信頼性や実験方法の詳細を含む多数の要因を基にして値が選択される。[融点と沸点を除き、全データに参考文献が示されており、また値が実験値か推定値かがはっきりと示されている。]
Yaws Chemical Properties Handbook	「データ源の刊行物に基づき、有機化合物の実験値および推定値がまとめて提供されている」[このハンドブックは各性状についての一次参考文献リストを提供しているが、個々の値や化合物について参考文献が示されていない。しかし、データが実験で求められた値か推定値かは示されている。]

<sup>8</sup> CrossFire Beilstein, Licensed by MDL Information Systems GmbH

TOXNET 上の HSDB	HSDB は、データベースの領域内の主要テーマ分野の専門家委員会である科学的レビュー委員会 (the Scientific Review Panel ; SRP) によってピアレビューされている。全データに参考文献が付記され、ハンドブック、政府文書、技術報告書、および精選された一次学術雑誌文献で構成される中核文献群に典拠する。
The Pesticide Manual (現在は C Tomlin 編、以前は CR Worthing 編)	この文書 (第 12 版) の緒言と各項目の考察では、データが「ピアレビュー」されていることは示唆されていない。(物理化学性状の一例として) 蒸気圧について短い考察があり、入手可能な値に不一致がある場合には最低値が選ばれていることが明記されている。データの大部分は製造者から直接提供されているので、「ピアレビュー」されている可能性は低い。
Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials	本文書 (第 10 版) の前書きと緒言では、物理化学性状データが「ピアレビュー」されていることは示唆されていない。物理性状は、物質の有害性評価と正しい保管・使用方法の考案に役立つように選択されている。[値の参考文献の記載はない。]
Bretherick's Handbook of Chemical Reactive Hazards	複数のデータ源が使用されている。それらには、一次情報源 (概して専門家向け安全性学術雑誌であるが、一般的な化学文献も含む)、二次情報源 (反応性有害性データのみを選択している)、および読者から編集者への直接の事故報告が含まれている。入手可能な場合には文献の詳細が記載されている。緒言に、この文書の目的範囲・適用範囲の詳細がある。
Lange's Handbook of Chemistry	この文書の前書きには、「最も有用で信頼性のある情報の選択と正確な記載に全力を尽くした」とあるが、記載データの参考文献の提示はなく、データがどう評価されたのかについても示されていない。
Fire Protection Guide on Hazardous Materials, National Fire Protection Association	データ源またはデータが「ピアレビューされた」かどうかは示されていない。第 12 版の補遺 C に、この文書に含まれている「有害化学物質データシート」(NFPA 49)の改訂版の作成に関する考察があり、一次情報源は化学物質等安全性データシートであると記載されている。一般にこれらは信頼できる物理化学性状データ源とはみなされない。[値の参考文献の提示はない]
Verschuieren, K. Handbook on Environmental Data on Organic Chemicals	Verchuieren に収載されている物理化学性状についてと、環境中での挙動の評価にそれらをどのように利用できそうかについて有用な考察がなされているが、報告されているデータの収集に用いられたデータ源についても、データがどのように評価されたかについても記載はない。水への溶解度や Log Kow 等のパラメーターについては単独値ではなく範囲が示されている場合がある。[物理化学性状については参考文献の記載はないが、生物学的影響濃度、バイオアキュムレーションおよび分解率の項目については参考文献が示されている]
Dust Explosions in the Process Industries (R. Eckhoff)	各種粉塵タイプの平均粒度および粒度分布、並びに可燃性分類 (これは SIDS エンドポイントではない) 以外、SIDS データセットに関連する物理化学データはこの参考文献源には示されていない。

## 参考文献

Bretherick (1999) Bretherick's Handbook of Chemical Reactive Hazards: An Indexed Guide to Published Data, 6th Edition (2 volume set). P Urben and L Bretherick (Authors). Butterworth Heinemann

CRC (2000) CRC Handbook of Chemistry and Physics 81st Edition. Editor in Chief, D. Lide. CRC Press

Eckhoff RK (1997) Dust Explosions in the Process Industries 2nd Edition. Butterworth-Heinemann, Oxford, UK

Hawley (2001) Hawley's Condensed Chemical Dictionary 14th Edition. Edited by GG Hawley. 14th Edition revised by RJ Lewis Sr. Wiley, New York, USA

IUPAC Solubility Data Series. 国際純正応用化学連合-米国標準技術研究所 (the International Union for Pure and Applied Chemistry-National Institute of Standards and Technology (NIST) Solubility)で最初に発表された溶解度を含むデータベース。Data Seriesは、<http://srdata.nist.gov/solubility/>にてオンラインで閲覧できる。(1994年～) Oxford University Pressにより学術雑誌シリーズとして刊行されている。

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

Lange (1998) Lange's Handbook of Chemistry 15th Edition. Edited by JA Dean and NA Lange. McGraw Hill, New York and London.

Mackay D, Shiu WY and Ma KC (1991-1997) Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals (Volumes 1-5). Lewis Publishers, Boca Raton, USA

Merck (2001) *Merck Index 13th Edition*. Edited by S Budavari et al. Merck & Co, Inc, USA

National Fire Protection Association (1997) Fire Protection Guide to Hazardous Materials 12th Edition. National Fire Protection Association, Quincy, MA, USA

Tomlin CDS (2000) The Pesticide Manual: A World Compendium 12th Edition. Editor: CDS Tomlin. British Crop Protection Council, Surrey, UK

Sax (2000) Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials 10th Edition (3 volume set). Edited by RJ Lewis Sr. John Wiley & Sons Inc, New York, USA

Verschuere K (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals 4th Edition (2 volume set). John Wiley & Sons Inc, New York, USA

Yaw CL (1999) Chemical Properties Handbook: Physical, thermodynamic, environmental, transport, safety, and health related properties for organic and inorganic chemicals. McGraw Hill, New York and London.