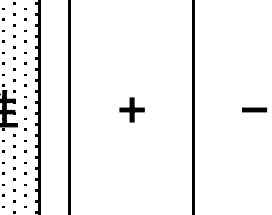
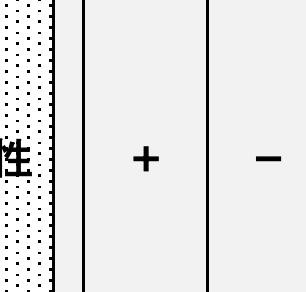
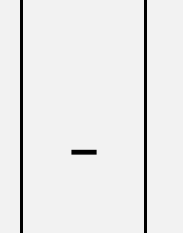
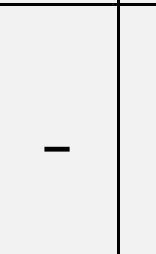
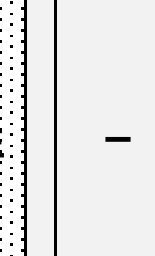
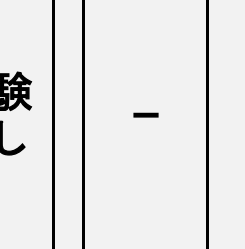
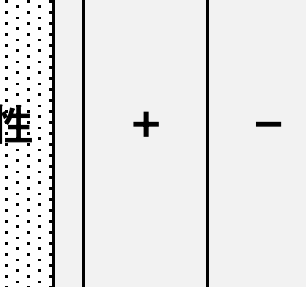


構造活性相関検討結果等(専門家からの意見聴取(その1)に係る物質)

| 名称  |                                                                                       | コンピューター<br>のシステムによる<br>結果予想 |                        | 実際の<br>試験の結果(既<br>存データ)  |          | コンピューター<br>のシステムによる<br>結果予想 |                   | 実際の<br>試験の結果(既<br>存データ) |                          | コンピューター<br>のシステムによる<br>結果予想 |       | 実際の<br>試験の結果<br>(既存データ)            |                            |                    |                    |                    |                          |          |                  |                      |                  |       |                                                 |                                                                             |                                           |                                  |                |                   |        |                                                                                                                            |                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                |                                |  |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|------------------------|--------------------------|----------|-----------------------------|-------------------|-------------------------|--------------------------|-----------------------------|-------|------------------------------------|----------------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------------|----------|------------------|----------------------|------------------|-------|-------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|----------------------------------|----------------|-------------------|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------|--|
|     |                                                                                       | エームス試験                      |                        |                          |          | 染色体異常試験                     |                   |                         |                          | がん原性試験(参考)                  |       |                                    |                            |                    |                    |                    |                          |          |                  |                      |                  |       |                                                 |                                                                             |                                           |                                  |                |                   |        |                                                                                                                            |                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                |                                |  |
| CAS | DEREK                                                                                 | MCASE                       | Aworks<br>AMES,CLKNN,3 | 構造相<br>関判定<br>結果<br>(注1) | 試験<br>結果 | DEREK                       | MCASE<br>kirkland | Aworks<br>SVM,SVM,1     | 構造相<br>関判定<br>結果<br>(注1) | 試験<br>結果                    | DEREK | Mcase<br>Carcin<br>ogenic<br>-Mice | Carcin<br>ogenic<br>- Rats | Carc_SV<br>M,ADA,1 | Carc_SV<br>M,SVM,1 | Carc_SV<br>M,KNN,1 | 構造相<br>関判定<br>結果<br>(注2) | 試験<br>結果 | 排出・移動<br>量合計(kg) | 生産量等<br>(t)<br>(注 3) | 生産量等 (t)<br>(注4) | 用途    | ①融点(℃)<br>②沸点(℃)<br>③蒸気圧                        | 性状                                                                          | I<br>A<br>R<br>C                          | A<br>C<br>G<br>I<br>H            | E<br>P<br>A    | がん原性情報<br>(2年間試験) | 変異原性情報 | 対象と<br>なった<br>理由<br>(注5)                                                                                                   | 備考                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                                                                |                                |  |
| A1  |    | 75-26-3                     | +                      | -                        | +        | 陽性                          | 陽性                | +                       | +                        | +                           | 陽性    | 陽性                                 | +                          | -                  | -                  | -                  | -                        | +        | 陰性               | 試験なし                 | 9,622            | 100   | 10 <sup>2</sup> ~10 <sup>3</sup> t未満            | 農業・医薬中間体、各種有機合成用                                                            | ① -89<br>② 59-60<br>③ 28.9 kPa (25℃)      | 無色の液体                            | -              | -                 | -      | -                                                                                                                          | 微生物を用いる変異原性試験 陽性(TA100(+/-)、WP2uvrA(+/-)、TA1535(+/-)、最大比活性値 212 )<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20＝0.58)<br>※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)                                                                                                     | A                                                                                                              | 生殖毒性物質                         |  |
| A2  |     | 75-38-7                     | +                      | +                        | +        | 陽性                          | 陽性                | -                       | -                        | +                           | 陰性    | 試験なし                               | +                          | +                  | -                  | +                  | -                        | +        | 陽性               | 評価には不充分              | -                | 記載なし  | 10 <sup>3</sup> ~10 <sup>4</sup> t未満            | フッ素ゴム、フッ素樹脂原料                                                               | ① -144<br>② -85.7<br>③ 30200 mmHg (25℃)   | 気体                               | 3              | 4                 | -      | ラットに52週間強制経口投与後、141週まで観察した試験で、脂肪肉腫、脂肪腫が少数観察されたが、不十分な試験であるとしている。(ACGIH)                                                     | 微生物を用いる変異原性試験 50%ガス16時間では陰性であるが、24時間曝露で曝露弱い陽性(TA100(+)) (IARC Vol.71, ACGIH)                                                                                                                                                                  | B                                                                                                              | NTPは13週試験を終えているが報告書は出さないとしている。 |  |
| A3  |    | 88-74-4                     | +                      | +                        | -        | 陽性                          | 陽性                | +                       | (擬陽性)                    | +                           | +     | +                                  | 陽性                         | 陽性                 | +                  | -                  | -                        | -        | +                | 陰性                   | 試験なし             | -     | 記載なし                                            | 10 <sup>3</sup> ~10 <sup>4</sup> t未満<br>各異性体の合計                             | 医薬・染料・顔料・ゴム薬原料                            | ① 69-71<br>② 284<br>③ 4 Pa (20℃) | 固体             | -                 | -      | -                                                                                                                          | -                                                                                                                                                                                                                                             | 微生物を用いる変異原性試験 陽性(最大比活性値 1000以上 )<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20＝0.23 Poly )<br>※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008) | A                              |  |
| A4  |  | 95-48-7                     | -                      | -                        | -        | 陰性                          | 陰性                | +                       | +                        | -                           | 陽性    | 陽性                                 | -                          | -                  | -                  | -                  | +                        | -        | 陰性               | 試験なし                 | 496,732<br>クレゾール | 記載なし  | 10 <sup>4</sup> ~10 <sup>5</sup> t未満<br>各異性体の合計 | エポキシ樹脂・農薬・酸化防止剤・可塑剤 (リン酸トリクレジル等)・フェノール樹脂合成原料、電線ワニス溶剤、消毒液<br>出典 NITE初期リスク評価書 | ① 30<br>② 191-192<br>③ 0.04 kPa (25℃)     | 白色結晶                             | -              | -                 | C      | -                                                                                                                          | CHO 細胞を用いる染色体異常試験及び姉妹染色分体交換(SCE)試験並びにヒト線維芽細胞のSCE試験で陽性との報告はあるものの、ネズミチフス菌を用いる復帰突然変異試験、マウスリンフォーマ細胞を用いる突然変異試験、BALB 3T3 細胞を用いる形質転換試験で代謝活性化系の有無にかかわらず陰性と報告され、ラット初代肝培養細胞を用いる不定期DNA 合成(UDS)試験、ヒト線維芽細胞を用いるSCE 試験の代謝活性化系を添加しない場合で陰性と報告されている。(ハザード評価シート) | B                                                                                                              |                                |  |
| A5  |  | 98-88-4                     | +                      | +                        | -        | 陽性                          | 陰性？               | -                       | +                        | +                           | 陽性    | 試験なし                               | -                          | -                  | +                  | -                  | -                        | -        | 陰性               | 陽性？                  | -                | 記載なし  | 10 <sup>3</sup> ~10 <sup>4</sup> t未満            | 有機過酸化物質原料・染料原料、有機合成原料                                                       | ① -1<br>② 197.2<br>③ 0.625 mmHg (25℃)     | 無色～黄色を帯びた刺激性催涙性の液体               | 2A<br>混合<br>曝露 | 4                 | -      | マウスの皮膚塗布試験で2つの試験とも皮膚と肺の腫瘍が有意ではないが増加した。(ACGIH)                                                                              | 微生物を用いる変異原性試験ではほとんど陰性の報告であるが、加水分解の可能性が指摘され結論付けられないとしている。(ACGIH)                                                                                                                                                                               | B                                                                                                              |                                |  |
| A6  |  | 100-69-6                    | -                      | -                        | -        | 陰性                          | 陽性                | +                       | +                        | -                           | 陽性    | 陽性                                 | -                          | -                  | -                  | -                  | -                        | -        | 陰性               | 試験なし                 | 4,420            | 1,500 | 673                                             | 自動車タイヤコード接着利用樹脂・医薬・界面活性剤利用合成原料<br>出典 NITE初期リスク評価書                           | ① -50<br>② 159-160<br>③ 10 mmHg (44.5℃)   | 無色ないし淡黄色の液体                      | -              | -                 | -      | -                                                                                                                          | 微生物を用いる変異原性試験 陽性(WP2uvrA/pKM101(+/-)、最大比活性値 102 )<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20＝0.0064)<br>※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)                                                                                                                   | A                                                                                                              |                                |  |
| A7  |  | 108-44-1                    | -                      | -                        | -        | 陰性                          | 陰性                | -                       | +                        | +                           | 陽性    | 試験なし                               | -                          | -                  | -                  | -                  | +                        | +        | 陰性               | 評価には不充分              | -                | 記載なし  | 337                                             | 有機合成原料                                                                      | ① 約-50<br>② 203-204<br>③ 0.303 mmHg (25℃) | 無色の液体                            | -              | 4                 | -      | ラット、マウスの混餌試験で雄マウスの低用量群でのみ肝臓腫瘍の発生が増加した。(ACGIH)                                                                              | 微生物を用いる変異原性試験、ラット肝細胞による不定期DNA合成試験とも陰性(ACGIH)                                                                                                                                                                                                  | B                                                                                                              |                                |  |
| A8  |  | 118-75-2                    | +                      | -                        | -        | 陰性                          | 陽性                | -                       | +                        | -                           | 陰性    | 陽性                                 | +                          | -                  | -                  | +                  | +                        | -        | 陽性               | 評価には不充分              | -                | 300   | 記載なし                                            | 医薬・染料・顔料・ゴム薬原料                                                              | ① 290<br>② -<br>③ <7.5E -06 mmHg (25℃)    | 黄金色の結晶粉末                         | -              | -                 | -      | マウスを用いた経口投与試験で、「不確かな発がん性」(HSDB(2002))との記述と、マウスを用いた18ヶ月間経口投与試験で「雄の肝臓と肺に腫瘍が見られたが、発生例は少なかった」(BUA 85(199))との記述がある。(経済産業省GHS分類) | 微生物を用いる変異原性試験 陽性(TA100(+)、最大比活性値 1120 )<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20＝0.017)<br>※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)                                                                                                                              | A                                                                                                              |                                |  |

労働現場におけるばく露形態として一般的に最も可能性が高いとされる「吸入」によるがん原性試験を優先的に行う物質を選定するための基礎資料  
(ヒト又は動物に対する吸入ばく露による実際のがん原性は上記の全ての物質について不明)



構造活性相関検討結果等(専門家からの意見聴取(その1)に係る物質)

|     | 名称                                                                               | CAS       | エームス試験   |                       |                   |                          |          | 染色体異常試験  |                       |                            |                          |          | がん原性試験(参考) |                             |                       |                       |                       |                       |          | 排出・移動<br>量合計(kg) | 生産量等<br>(t)<br>(注 3)      | 生産量等 (t)<br>(注4) | 用途                                              | ①融点(℃)<br>②沸点(℃)<br>③蒸気圧                                                                                                                                              | 性状                                              | I<br>A<br>R<br>C  | A<br>C<br>G<br>I<br>H | E<br>P<br>A | がん原性情報<br>(2年間試験) | 変異原性情報                                                                                                                                                                                              | 対象と<br>なった<br>理由<br>(注5)                                                                                                                                                     | 備考 |                                                          |          |
|-----|----------------------------------------------------------------------------------|-----------|----------|-----------------------|-------------------|--------------------------|----------|----------|-----------------------|----------------------------|--------------------------|----------|------------|-----------------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|----------|------------------|---------------------------|------------------|-------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------|-------------------|-----------------------|-------------|-------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|----------------------------------------------------------|----------|
|     |                                                                                  |           | DEREK    | MCASE                 | Aworks            | 構造相<br>関判定<br>結果<br>(注1) | 試験<br>結果 | DEREK    | MCASE                 | Aworks                     | 構造相<br>関判定<br>結果<br>(注1) | 試験<br>結果 | DEREK      | Mcase                       |                       |                       | ADMEWORKS             |                       |          |                  |                           |                  |                                                 |                                                                                                                                                                       |                                                 |                   |                       |             |                   |                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                              |    | 構造相<br>関判定<br>結果<br>(注2)                                 | 試験<br>結果 |
|     |                                                                                  |           |          |                       | AMES_C<br>L_KNN_3 |                          |          |          |                       | Carcin<br>ogenici<br>-Mice |                          |          |            | Carcin<br>ogenici<br>- Rats | Carc_SV<br>M_ADA_1    | Carc_SV<br>M_SVM_1    | Carc_SV<br>M_KNN_1    |                       |          |                  |                           |                  |                                                 |                                                                                                                                                                       |                                                 |                   |                       |             |                   |                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                              |    |                                                          |          |
| A9  | <div>4-アミノフェノール</div> <div></div>                                                | 123-30-8  | -        | -                     | +                 | 陰性                       | 陽性       | +        | +                     | +                          | 陽性                       | 陽性       | -          | -                           | +                     | -                     | +                     | +                     | 陽性       | 試験なし             | -                         | 400              | 10 <sup>2</sup> ～10 <sup>3</sup> t未満<br>各異性体の合計 | 硫化染料中間体、ゴム老化防止<br>剤、写真現像薬原料                                                                                                                                           | ① 189.6-190.2<br>② 284<br>③ 0.075 mmHg<br>(20℃) | 白色ないし薄茶色<br>の粉末   | -                     | -           | -                 | ラットに0.087%の濃度で9 ヶ月間<br>混餌投与した発がん実験では、投<br>与に関連した組織への影響はみ<br>られなかった。<br>(1948発表)(環境省リスク評価書)<br>※既存化学物質変異原性試験デー<br>タ集補遺4版(JETOC.2008)                                                                 | 微生物を用いる変異原性試験 陽<br>性(WP2uvrA/pKM101(+,-)、最大比<br>活性値 60.8 )<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異<br>常試験 陽性(D20=0.00078)<br>※既存化学物質変異原性試験デー<br>タ集補遺4版(JETOC.2008)                                | A  |                                                          |          |
| A10 | <div>ブチルアルデヒド</div> <div></div>                                                  | 123-72-8  | -        | -                     | +                 | 陰性                       | 陽性       | +        | -                     | -                          | 陰性                       | 陽性       | +          | -                           | -                     | +                     | -                     | -                     | 陰性       | 試験なし             | -                         | 輸出<br>4,470      | 記載なし                                            | 合成樹脂原料、2-エチルヘキシ<br>ルアルコール原料、ゴム加硫<br>促進剤                                                                                                                               | ① -99<br>② 74.8<br>③ 111 mmHg<br>(25℃)          | 無色液体              | -                     | -           | -                 | ヒトへの影響において、「ブチルア<br>ルデヒドの暴露は労働者における<br>気道上皮のがんと高温での処理<br>に関する肺がんに関連しているか<br>もしれないが、他の反応性の高い<br>アルデヒド類の暴露可能性もあ<br>り、ブチルアルデヒド単独の反応<br>かは不明である」(PATTY 5th<br>vol.5,2001)とあり、分類できないと<br>した。(厚生労働省GHS分類) | 微生物を用いる変異原性試験 陽<br>性(最大比活性値 1000以上 )<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異<br>常試験 陽性(D20=0.021 Poly )<br>※既存化学物質変異原性試験デー<br>タ集補遺4版(JETOC.2008)                                                  | A  | NTPは13週試<br>験を終えてい<br>るが報告書は出<br>さないとしてい<br>る。           |          |
| A11 | <div>4-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)<br/>フェノール</div> <div></div>                        | 140-66-9  | -        | -                     | +                 | 陰性                       | 陰性       | -        | -                     | -                          | 陰性                       | 陽性       | -          | -                           | -                     | +                     | -                     | -                     | 陰性       | 試験なし             | 38,039<br>パラオクチル<br>フェノール | 記載なし             | 17,970                                          | 油性性フェノール樹脂・界面活性<br>剤原料                                                                                                                                                | ① 85.8<br>② 279<br>③ 0.000478<br>mmHg (25℃)     | 白色フレーク状           | -                     | -           | -                 | -                                                                                                                                                                                                   | 微生物を用いる変異原性試験 陰<br>性<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異<br>常試験 陽性(D20=0.066 )<br>※既存化学物質変異原性試験デー<br>タ集補遺4版(JETOC.2008)                                                                       | A  |                                                          |          |
| A12 | <div>2,3-ジクロロ-1-プロパノール</div> <div></div>                                         | 616-23-9  | +        | +                     | +                 | 陽性                       | 陽性       | +        | -                     | +                          | 陽性                       | 試験なし     | +          | +                           | +                     | -                     | -                     | +                     | 陽性       | 試験なし             | -                         | 記載なし             | 記載なし                                            | トルエンジアミン原料、火薬中間<br>体、染料中間体<br>出典 NITE初期リスク評価書                                                                                                                         | ① -<br>② 184<br>③ 0.184 mmHg<br>(25℃)           | 粘性のある液体           | -                     | -           | -                 | -                                                                                                                                                                                                   | 微生物を用いる変異原性試験 陽<br>性(TA97(+,-), TA98(+,-), TA100(+,-<br>, TA1535(+,-))<br>(NTP Data Base)                                                                                    | A  |                                                          |          |
| A13 | <div>1,3,5-トリス(2,3-エポキシプロピル)ヘキ<br/>サヒドロ-1,3,5-トリアジン-2,4,6-トリオン</div> <div></div> | 2451-62-9 | +        | +                     | +                 | 陽性                       | 陽性       | +        | +                     | +                          | 陽性                       | 陽性       | +          | +                           | +                     | +                     | +                     | -                     | 陽性       | 試験なし             | 31,707                    | 記載なし             | 3,256                                           | 粉体塗料 (ポリエステル系の硬<br>化剤)、ソルダ― (はんだ) レ<br>ジストインク、光半導体封止樹<br>脂、電気部品成形材料・強化フ<br>ラステック・接着用・耐熱レジス<br>トインキ・エポキシ樹脂改質材<br>(耐熱性、剛性、硬度、反応性向<br>上)・難燃プラスチックの安定剤<br>出典 NITE初期リスク評価書 | ① 95.3<br>② -<br>③ 5.4E -08<br>mmHg (20℃)       | 白色固体              | -                     | -           | -                 | -                                                                                                                                                                                                   | 微生物を用いる変異原性試験 陽<br>性(TA98(+,-), TA100(+,-),<br>TA1535(+,-)、最大比活性値 2640 )<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異<br>常試験 陽性(D20=0.00013 )<br>※既存化学物質変異原性試験デー<br>タ集補遺4版(JETOC.2008)                 | A  |                                                          |          |
| A14 | <div>酢酸コハルト(II)=四水和物</div> <div></div>                                           | 6147-53-1 | 予測<br>不能 | 予測<br>不能              | 予測<br>不能          | 予測<br>不能                 | 陽性       | 予測<br>不能 | 予測<br>不能              | 予測<br>不能                   | 予測<br>不能                 | 陽性       | 予測<br>不能   | 予測<br>不能                    | 予測<br>不能              | 予測<br>不能              | 予測<br>不能              | 予測<br>不能              | 予測<br>不能 | 試験なし             | -                         | 650              | 記載なし                                            | ワニス塗料乾燥剤、ワニス原<br>料、陶器顔料、液相酸化触媒、<br>アルミニウム表面処理剤、医薬<br>中間体<br>出典 NITE調査                                                                                                 | 140℃で結晶水が<br>失われる                               | 赤紫色結晶また<br>は結晶性粉末 | -                     | -           | -                 | -                                                                                                                                                                                                   | 微生物を用いる変異原性試験 陽<br>性(TA98(-), TA100(-),<br>WP2uvrA/pKM101(-), TA1537(-),<br>最大比活性値 2580 )<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異<br>常試験 陽性(D20=0.0092 )<br>※既存化学物質変異原性試験デー<br>タ集補遺4版(JETOC.2008) | A  |                                                          |          |
| A15 | <div>次亜塩素酸カルシウム</div> <div></div>                                                | 7778-54-3 | -        | Caの<br>ため<br>予測<br>不能 | +<br>(擬陽<br>性)    | 陰性                       | 陽性       | +        | Caの<br>ため<br>予測<br>不能 | +                          | 陽性                       | 陰性       | -          | Caの<br>ため<br>予測<br>不能       | Caの<br>ため<br>予測<br>不能 | Caの<br>ため<br>予測<br>不能 | Caの<br>ため<br>予測<br>不能 | Caの<br>ため<br>予測<br>不能 | 陰性       | 試験なし             | -                         | 25,000<br>60%換算  | 10 <sup>4</sup> ～10 <sup>5</sup> t未満            | 漂白剤、殺菌剤、有機・無機薬<br>品原料、殺菌剤(失効薬)                                                                                                                                        | ① 100℃で分解<br>② -<br>③ -                         | 白色粉末              | 3                     | -           | -                 | IARC 52 (1991) p159-176<br>Hypochlorite saltsの評価                                                                                                                                                    | 微生物を用いる変異原性試験 陽<br>性(TA1530(+), TA1535(+))<br>ほ乳類培養細胞を用いる染色体異<br>常試験 陽性(IARC Vol. 52)                                                                                        | B  | 本物質は純品<br>としては得がた<br>く、有効塩素濃<br>度で品位を表す<br>のが一般的で<br>ある。 |          |

(注1) 構造活性相関の結果判定は「予測不能」がある等同数の場合は陽性として評価した。  
(注2) 構造活性相関、がん原性の結果判定は、DEREK、Mcase、ADMEWORKSそれぞれについて行い、3手法のうち多数のものを最終的判定とした。  
(注3) 「15710の化学商品」(化学工業日報社)に記載の2008年生産量。輸入量、輸出品の場合も有り。  
(注4) H19年度製造・輸入量-経済産業省実態調査結果 (10のべき乗表示) 又は H20年化審法監視化学物質届出結果  
(注5) A : 変異原性が認められた既存化学物質、B : 国際機関で発がん性が分類できないとされた物質、C : 優先評価物質

労働現場におけるばく露形態として一般的に最も可能性が高いとされる「吸入」によるがん原性試験を優先的に行う物質を選定するための基礎資料  
(ヒト又は動物に対する吸入ばく露による実際のがん原性は上記の全ての物質について不明)