構造活性相関検討結果(専門家からの意見聴取(その2)に係る物質)

				のシステ	ューター ・ムによる !予想	試 結 (既	祭の 験の i果 玩存 ータ)	のシ	ンピューター レステムによる 結果予想	5	実際の 試験の 結果(既 存デー タ)		のシス・	³ ューター テムによる 果予想			実際の試 験の結果 (既存デー タ)											
																												
	名称	CAS	エームス試験 Aworks Ltt. Value					染色体異常試験 MCASE Aworks L# V# JE				T	がん原性試験(参考) Mcase ADMEWORKS					排出·移動 量合計(kg) 生產量等 (t) (注 3)	生産量等 (t)	ш УД	①融点(°C) ②沸点(°C) ③蒸気圧	性状	I A C G	E がん原性情報	変異原性情報	対象と なった 理由 (注5)	## 	
	42 175		DERI K	E MCAS	AMES_ CL_KNN _3	構造相 関判定 試 結果 結 (注1)	験 DE i果 I	ERE K kirk	ASE Aworks SVM_SV M_1	┤構造相 関判定/ 結果(注1)	試験 結果	DERE K	Mcase Carcin Carcin ogenici ogenic -Mice - Rate	Carc_SV M_ADA_1	Carc_SV M_SVM_ M_KNN	─ 構造相 関判定 ^V 結果 - ¹ (注2)	試験 結果	排出·移動 量合計 ^(kg) (注 3)	(注 3)	生産量等 (t) (注4)	用途	③蒸気圧		R I H	、)(2年間試験)	及 共	理由 (注5)	備考
В1	N,N'-ジフェニル-1,4-フェニレンジアミン	74-31-7	_	_	_	陰性陽	·性 -	+	+ +	陽性	陽性	_		+	+ +	陰性	試験なし	_	15	記載なし	有機ゴム薬品(老化防止剤)	① 150-151 ② 220-225 ③ 6.35E-09 mmHg (25°C)				微生物を用いる変異原性試験 陽性(最大比活性値 1000以上) ほ乳類培養細胞を用いる染色体 常試験 陽性(D20=0.0067) ※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)	A —	
В2	3,3'-ジメチル-4,4'-ビフェニレンジイソシアネート (o -トリジン・ジイソシアネート)	91–97–4	+	+	+	陽性陽	·性 -	+	- +	陽性	陽性	_	- +	_		陰性	試験なし	_	400	記載なし	ウレタンエラストマー原料, パッキング材原料	① 70 ② 314 ③ 0.01 mmHg (93°C)	固体		_	微生物を用いる変異原性試験 陽性(TA98(+), TA1538(+)、最大比活性値 13900) ほ乳類培養細胞を用いる染色体身常試験 陽性(D20=0.79) ※既存化学物質変異原性試験デタ集補遺4版(JETOC,2008)	₽ A	
вз	硫酸パラジメチルアミノフェニルジアゾニウムナトリウム	140-56-7	+	+	_	陽性陰	:性 -	_	- +	陰性	陽性	+ (擬陽 性)		_	+ -	陰性	陰性	_	記載なし	記載なし	殺菌剤(失効農薬) 出典 NITE調査	① 200 ℃以上で 分解 ② - ③ 5.7E-13mmHg (25℃)	固体		ラット、マウスの混餌試験で腫り - の発生増加はみられなかった。 (NCI TR-101)	微生物を用いる変異原性試験 陰性はは乳類培養細胞を用いる染色体身常試験 陽性(RTECS)	В	

⁽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。

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)

⁽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、輸出量の場合も有り。

⁽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