

平成 26 年度エームス試験対象物質の選定方針及び選定状況

1 平成 25 年度構造活性相関予測で「総合判定+」と評価された物質（計 39 物質）からの選定

次の（１）～（４）の作業 ⇒ 14 物質がエームス試験対象

- （１） 試薬購入の可否を確認し、「否」の 17 物質を除外
- （２） 残り 22 質中 1 物質が EPA 発がん性分類があることが判明したため、除外
→ 発がん性評価 WG の作業へ
- （３） 残り 21 物質について、次のデータベースによりエームス試験情報の有無を確認し、少なくともいずれかに情報があれば除外
（４物質についてデータあり、委員の評価が必要）
 - ・ 国立医薬品食品衛生研究所の「既存化学物質毒性データベース」
 - ・（独）製品評価技術基盤機構の「化学物質総合情報提供システム（CHRIP）」
- （４） 39 物質から（１）～（３）の 22 物質を除いた 17 物質のうち、試薬の高価な 3 物質について試験を保留

2 平成 25 年度文献調査の結果、エームス試験情報がない物質（179 物質）からの選定

次の（１）～（４）の作業 ⇒ 5 物質がエームス試験対象

- （１） 構造式入手可能な 169 物質について構造活性相関予測を実施し、26 物質が総合判定「+」（26 年度分として実施済み）
- （２） 26 物質中 1 物質は、特定化学物質の第一類物質として規制済みのため除外
- （３） 残り 25 物質のうち、上記 1（３）の 2 種類のデータベースにより、エームス試験情報の有無を確認し、少なくともいずれかに情報があれば除外
（19 物質についてデータあり。うち 3 物質は事務局評価により陰性、残り 16 物質は委員の評価が必要。）
- （４） 26 物質から（２）、（３）の 20 物質を除いた 6 物質について、試薬購入の可否を確認し、「否」の 1 物質を除外

3 平成 25 年度文献調査の結果、エームス試験のデータがあり、かつ、Neg 以外の遺伝毒性試験データがある物質について、遺伝毒性評価 WG 委員が評価を行い、次のいずれかに評価された物質（数は未定）からの選定

- ・ ④遺伝毒性ありだが、強弱の判断不能
- ・ ⑤遺伝毒性の有無の判断困難
- ・ エームス試験不備のため、評価保留

次の（１）～（３）の作業により選定予定

- （１）26 年度第 3 回遺伝毒性評価 WG（7 月 4 日）で、遺伝毒性を評価
- （２）上記の④、⑤又は「評価保留」と評価された物質のうち、エームス試験候補物質を選定
- （３）上記 1（３）の 2 種類のデータベースにより、エームス試験情報の有無を確認し、少なくともいずれかに情報があれば除外
- （４）試薬購入の可否を確認し、「否」のものを除外










平成26年度のエームス試験対象物質選定状況


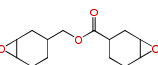
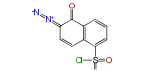
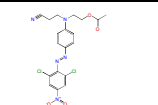
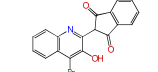
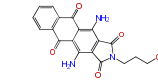
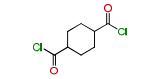
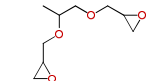
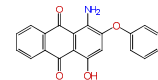
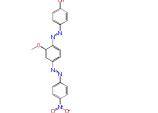
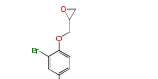
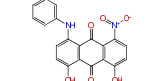
(1)平成25年度構造活性相関予測で「総合判定+」の物質からの選定【39物質からの選定】

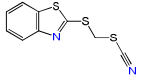
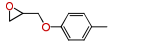
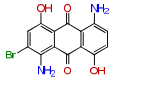
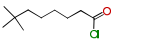
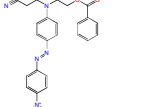
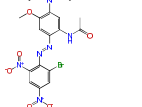
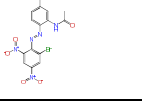
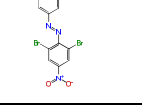
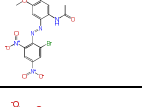
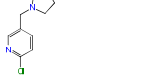
試験入手の可否、エームス試験情報の有無等を確認し、14物質を26年度エームス試験対象に

※39物質中4物質は、エームス試験データがあるため、今後、委員の評価を実施予定

※39物質中1物質は、EPAの発がん性分類ありのため、発がん性評価WGでの作業へ

CAS	名称	構造式	平成25年度の構造活性相関の推計結果				製造輸出入量 (2011年) (t)	主な用途	常温での 性状	融点(°C)	沸点(°C)	蒸気圧	試験入手 の可否	試験入手「可」の場合、 「既存化学物質毒性データベース」「CHTRIP」の エームス試験情報の有無	26年度に エームス試験を 「実施中」又は 「実施予定」	委員による遺伝毒性の評価	
			Derek Nexus	ADME WORKS	CaseUltra	総合 判定										左記データベースの エームス試験情報を 踏まえた評価 (4物質、26年度に 評価予定)	26年度実施予定の エームス試験の評価 及び 文献調査を加味した 総合評価 (14物質、27年度に 評価予定)
1	75-91-2	tert-ブチル=ヒドロペルオキシド		+	-	+	+	7000	樹脂製造用重合剤、硬化剤	液体	-8	35	5.48mmHg (25°C)	○	なし	●	(評価予定)
2	99-63-8	イソフタル酸ジクロリド		+	-	+	+	2000	耐熱性繊維樹脂原料	固体	43.5	276	0.03mmHg (25°C)	○	なし	●	(評価予定)
3	100-20-9	テレフタル酸クロライド		+	-	+	+	4000	アラムド繊維・合成樹脂・染料・顔料原料	固体	83.5	253	0.02mmHg (25°C)	○	なし	●	(評価予定)
4	106-91-2	オキシラン-2-イルメチル=メタクリラート 別名:メタクリル酸グリシジル		+	-	+	+	5000	熱硬化性塗料・繊維処理剤・イオン交換樹脂・帯電防止剤原料	固体	79	189	0.42 kPa (25°C)	○	なし	●	(評価予定)
5	870-24-6	(2-クロロエチル)アンモニウム =クロリド		+	+	+	+	2社以下のため非公表	有機合成中間体原料	固体	146.3		2.97E-05 mmHg (25°C推定値)	○	なし	●	(評価予定)
6	1533-78-4	5-[ビス(2-アセトキシエチル)アミノ]-2-(2-クロロ-4-ニトロフェニルアゾ)アセトアニリド		+	+	+	+	<1000	染料	固体	127			×			
7	1667-10-3	4, 4'-ビス(クロロメチル)ビフェニル		+	+	+	+	1000	蛍光増白剤・液晶・機能性樹脂中間体	固体	138	184		○	毒性データベース(H22年、Pos)	※エームス試験データがあるため、試験不要	【評価予定】
8	2052-25-7	ナトリウム=3-[(1,5-ジヒドロキシ-2-ナフチル)ジアゼニル]-4-ヒドロキシベンゼンスルホナート 別名:モルダント ブラック-9		+	+	-	+	<1000	媒染染料	不明		277-282		×			
9	2224-15-9	2, 2'-[1, 2-エタンジイルビス(オキシメチレン)]ビス(オキシラン)		+	-	+	+	1000	紙・繊維加工剤、樹脂改質剤、架橋剤	不明		112	0.14 mmHg (25°C)	○	毒性データベース(H22年、Pos)	※エームス試験データがあるため、試験不要	【評価予定】

10	2309-94-6	デイスパーズ ブルー-183		+	+	+	+	2社以下のた め非公表	データなし (染料と推測される)	固体		689		×				
11	2386-87-0	3,4-エポキシシクロヘキサシメ テル(3,4-エポキシ)シクロヘキ サンカルボキシレート		+	-	+	+	2000	電気材料・安定剤・ 塗料原料	液体	-37	188		○	なし	●		(評価予定)
12	3770-97-6	1,2-ナフトキノ-2-ジアジド -5-スルホニルクロライド		+	-	+	+	<1000	PS版感光材、フォト レジスト用感光材	固体	132		1.56E-12 mmHg (25°C推定値)	○	なし	●		(評価予定)
13	5261-31-4	2-[N-(2-シアノエチル)-4 -[(2,6-ジクロロ-4-ニトロ フェニル)ジアゼニル]アニリノ]エ チル=アセタート 別名:デイスパーズ オレンジ-3		+	+	+	+	<1000	分散染料	固体	133			×				
14	10319-14-9	デイスパーズ エロー-64		-	+	+	+	<1000	分散染料	固体	248.6			○	なし	(試薬が高価なた め、試験を見合わせ 中)		
15	12217-80-0	デイスパーズ ブルー-60		-	+	+	+	<1000	データなし	固体		677.5		○	なし	●		(評価予定)
16	13170-66-6	1,4-シクロヘキサンジカルボニ ル=ジクロリド		+	-	+	+	2社以下のた め非公表	データなし	液体				×				
17	16096-30-3	2,2'-[(1-メチルエチレン)ビス (オキシメチレン)]ビスオキシラン		+	-	+	+	<1000	データなし	不明		275分解		○	なし	●		(評価予定)
18	17418-58-5	デイスパーズ レッド-60 別名:1-アミノ-4-ヒドロキシ 2-フェノキソトラキノ		-	+	+	+	<1000	顔料	固体	183.8		2.1E-12 mmHg (25°C推定値)	○	なし	(試薬が高価なた め、試験を見合わせ 中)		
19	19800-42-1	デイスパーズ オレンジ-29		+	+	-	+	<1000	データなし (染料と推測される)	不明		597.3分解		×				
20	20217-01-0	2-[(2,4-ジブロモフェノキシ) メチル]オキシラン		+	-	+	+	データなし	エポキシ積層板・ フェノール積層板用 難燃剤	不明		341		×				
21	20241-76-3	デイスパーズ ブルー-77		+	+	+	+	<1000	分散染料	固体				○	経済産業省委託試験で Ames陽性, CHL/1U陰性	※エームス試験 データがあるた め、試験不要	【評価予定】	

22	21564-17-0	2-[(チオシアナトメチル)スルファニル]-1,3-ペンソチアゾール 別名:TCMTB		-	+	+	+	2社以下のため非公表	殺菌剤(失効農薬)	液体	-10	120	0.0525 mmHg	○	経口発がん性試験実施済みラット雄で甲状腺腫量の増加 ★EPAでG(ヒト発がんがあるかもしれない物質)と評価	※EPAの発がん性分類があるため、試験及び遺伝毒性評価WGでの作業不要	<発がん性評価WGの作業対象>	
23	26447-14-3	2-[(トリロキシ)メチル]オキシラン		+	-	+	+	<1000	樹脂改質剤	不明		175-195	2hPa (20°C)	○	なし	●		(評価予定)
24	31810-89-6	1,5-ジアミノプロモ-4,8-ジヒドロキシアントラセン-9,10-ジオン 別名:ディスパーズ ブルー-56、ディスパーズ ブルー-59		+	+	+	+	<1000	データなし(染料と推測される)	不明			1.1E-13 mmHg (25°C推定値)	×				
25	40292-82-8	ネオデカン酸クロライド		+	-	+	+	4000	医薬・農業・有機合成原料	液体		209		×				
26	40690-89-9	ディスパーズオレンジ73		+	+	+	+	<1000	分散染料	不明		672.1		×				
27	51868-46-3	2'-(2-プロモ-4,6-ジニトロフェニルアゾ)-5'-(ジアリルアミノ)-4'-メトキシアセトアニリド 別名:Disperse Blue 291G		+	+	+	+	<1000	分散染料	不明		716.2分解		×				
28	52697-38-8	2-(2-プロモ-4,6-ジニトロフェニルアゾ)-5-N,N-ジエチルアミノアセトアニリド		+	+	+	+	<1000	データなし	固体	184-186			×				
29	55281-26-0	3-[4-[(2,6-ジプロモ-4-ニトロフェニル)ジアゼニル]-N-エチルアニリノ]プロバンニトリル 別名:ディスパーズオレンジ61		+	+	+	+	<1000	分散染料	固体				×				
30	56548-64-2	2-(2-プロモ-4,6-ジニトロフェニルアゾ)-5-N,N-ジエチルアミノ-4-メトキシアセトアニリド 別名:ディスパーズブルー291		+	+	+	+	<1000	分散染料	不明		700.4		×				
31	105827-78-9	1-[(6'-クロロ-3'-ピリジリ)メチル]イミダゾリジン-2-(N-ニトロ)イミン		+	+	-	+	<1000	農薬(殺虫剤)	固体	143.8		1.5E-09mmHg (20°C)	○	なし	●		(評価予定)

32	107761-81-9	2, 3, 4, 4'-テトラヒドロキシベンゾフェノンと6-ジアゾ-5-オキソ-5, 6-ジヒドロナフタレン-1-スルホン酸とのエステル		+	+	+	+	2社以下のため非公表	データなし	固体	219-222			×				
33	117584-16-4	3-(2, 6-ジクロロ-4-ニトロフェニルアゾ)-1-メチル-2-フェニルインドール		+	+	+	+	2012年度<1000	データなし	不明				×				
34	153719-23-4	3-[(2-クロロ-1, 3-チアゾール-5-イル)メチル]-5-メチル-N-ニトロ-1, 3, 5-オキサジアジナン-4-イミン 別名: チアメキサム		+	+	-	+	20.2 (輸入)	農薬(殺虫殺菌剤)	固体	139.1		9.6E-09Pa (25°C)	○	なし	(試薬が高価なため、試験を見合わせ中)		
35	96-96-8	4-メキシ-2-ニトロアニリン		+	+	+	+	<1000	染料中間体	固体	129		3.19E-04 mmHg (25°C推定値)	○	毒性データベース(H19年、P05)	※エームス試験データがあるため、試験不要	【評価予定】	
36	446-35-5	2, 4-ジフルオロ-1-ニトロベンゼン		+	+	+	+	2社以下のため非公表	農薬・医薬・染料中間体、フッ素化合物原料	液体	9.8	207	0.254 mmHg (25°C推定値)	○	なし	●		(評価予定)
37	630-08-0	一酸化炭素		+	+	-	+	1000万	鉄鋼製造還元用ガス、合成原料ガス(ホスゲン、メタノール、アンモニア、金属カルボニル等)	気体	-205	-191.5		○	なし	●		(評価予定)
38	1326-82-5	C. I. サルファブラック1		-	+	+	+	<1000	染料, 顔料	固体		660.3	1.29E-05 mmHg (25°C推定値)	×				
39	29617-66-1	(2S)-2-クロロプロピオン酸		+	-	+	+	<1000	データなし	液体	4	77	4 hPa (60°C)	○	なし	●		(評価予定)