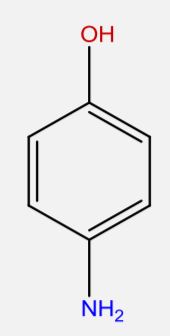

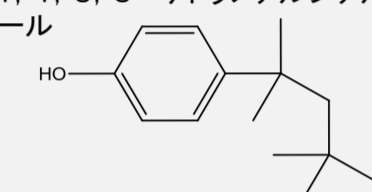
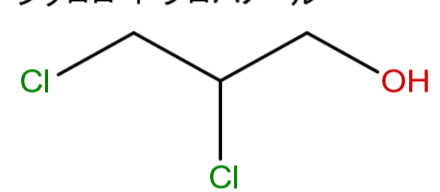
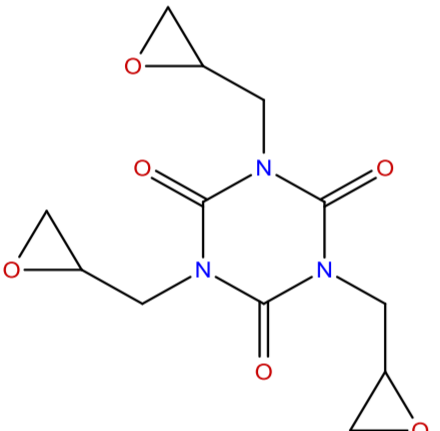
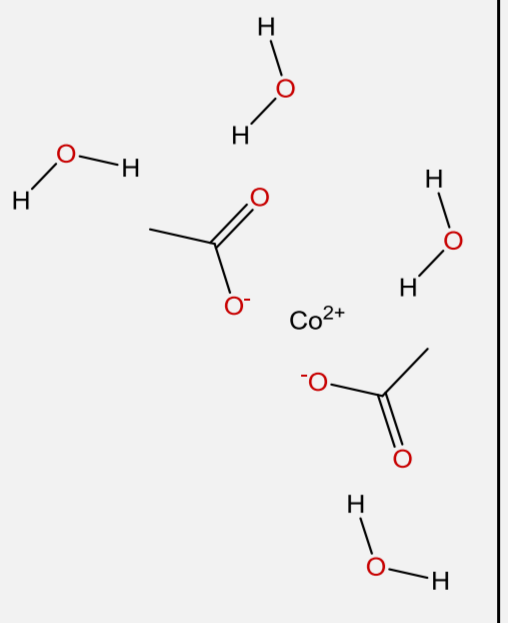
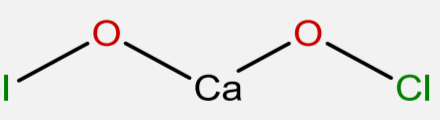


構造活性相関検討結果等(専門家からの意見聴取(その1)に係る物質)

名称	CAS	コンピューターのシステムによる結果予想		実際の試験の結果(既存データ)		コンピューターのシステムによる結果予想		実際の試験の結果(既存データ)		コンピューターのシステムによる結果予想		実際の試験の結果(既存データ)		排出・移動量合計(kg)	生産量等(t)(注3)	生産量等(t)(注4)	用途	①融点(°C) ②沸点(°C) ③蒸気圧	性状	IARC	ACGIH	EPA	がん原性情報(2年間試験)	変異原性情報	対象となった理由(注5)	備考					
		エームス試験				染色体異常試験				がん原性試験(参考)																					
		DEREK	MCASE	Aworks AMES,CL_KNN,3	構造相関判定結果(注1)	試験結果	DEREK	MCASE kirkland	Aworks SVM,SV_M,1	構造相関判定結果(注1)	試験結果	DEREK	Mcase Carcinogenicity-Mice														Carcinogenicity-Rats	ADMEWORKS Carc.SV_M,ADA,1	Carc.SV_M,SVM,1	Carc.SV_M,KNN,1	構造相関判定結果(注2)
A1 2-ブロモプロパン <chem>CC(C)CBr</chem>	75-26-3	+	-	+	陽性 陽性	+	+	+	陽性 陽性	+	-	-	-	-	+	陰性	試験なし	9.622	100	10 ² ~10 ³ t未満	農業・医薬中間体、各種有機合成	① -89 ② 59-60 ③ 28.9 kPa (25°C)	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) ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20=0.58) ※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 弗化ビニリデン <chem>C=C(F)F</chem>	75-38-7	+	+	+	陽性 陽性	-	-	+	陰性	試験なし	+	+	-	+	-	+	陽性	評価には不十分	-	記載なし	10 ³ ~10 ⁴ t未満	フッ素ゴム・フッ素樹脂原料	① -144 ② -85.7 ③ 30200 mmHg (25°C)	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れていないとしている。
A3 o-ニトロアニリン <chem>Nc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]</chem>	88-74-4	+	+	-	陽性 陽性	+	+	+	陽性 陽性	+	-	-	-	-	+	陰性	試験なし	-	記載なし	10 ² ~10 ⁴ t未満 各異性体の合計	医薬・染料・顔料・ゴム薬原料	① 69-71 ② 284 ③ 4 Pa (20°C)	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) ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20=0.23 Poly) ※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)	A	
A4 o-クレゾール <chem>Oc1ccccc1C</chem>	95-48-7	-	-	-	陰性 陰性	+	+	-	陽性 陽性	+	-	-	-	+	-	陰性	試験なし	496,732 クレゾール	記載なし	10 ⁴ ~10 ⁵ t未満 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 出典 NITE初期リスク評価書	① 30 ② 191-192 ③ 0.04 kPa (25°C)	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があるもの、ネズミマウス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 塩化ベンゾイル <chem>O=C(Cl)c1ccccc1</chem>	98-88-4	+	+	-	陽性 陰性?	-	+	+	陽性	試験なし	-	-	+	-	-	陰性	陽性?	-	記載なし	10 ³ ~10 ⁴ t未満	有機過酸化原料・染料原料、有機合成原料	① -1 ② 197.2 ③ 0.625 mmHg (25°C)	無色～黄色を帯びた刺激性催涙性の液体	2A 混合曝露	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 2-ピニルピリジン <chem>C=Cc1ccccn1</chem>	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剤用樹脂・医薬・界面活性剤用合成原料 出典 NITE初期リスク評価書	① -50 ② 159-160 ③ 10 mmHg (44.5°C)	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) ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20=0.0064) ※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)	A	
A7 m-トルイジン <chem>Nc1cccc(C)c1</chem>	108-44-1	-	-	-	陰性 陰性	+	-	+	陽性	試験なし	-	-	-	+	+	陰性	評価には不十分	-	記載なし	337	有機合成原料	① 約-50 ② 203-204 ③ 0.303 mmHg (25°C)	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 2,3,5,6-テトラクロロ-1,4-ベンゾキノン(別名: クロラニル) <chem>O=C1C(Cl)=C(Cl)C(Cl)=C1C(=O)Cl</chem>	118-75-2	+	-	-	陰性 陽性	-	+	-	陰性 陽性	+	-	-	+	+	-	陽性	評価には不十分	-	記載なし	300	医薬・染料・顔料・ゴム薬原料	① 290 ② - ③ <7.5E-06 mmHg (25°C)	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「雄の肝臓と胸に腫瘍が見られたが、発生例は少なかった」(BUA 85(1993))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) ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20=0.017) ※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・移動量合計(kg)	生産量等(t)(注3)	生産量等(t)(注4)	用途	①融点(°C) ②沸点(°C) ③蒸気圧	性状	IARC	ACGIH	EPA	がん原性情報(2年間試験)	変異原性情報	対象となった理由(注5)	備考			
		DEREK	MCASE	Aworks AMES, C L, KNN, 3	構造相 関判定 結果 (注1)	試験 結果	DEREK	MCASE kirkland	Aworks SVM, SV M, 1	構造相 関判定 結果 (注1)	試験 結果	DEREK	Mcase			ADMEWORKS																構造相 関判定 結果 (注2)	試験 結果	
													Carcin ogenici -Mice	Carcin ogenici -Rats	Carc.SV M, ADA, 1	Carc.SV M, SVM, 1	Carc.SV M, KNN, 1	Carcin ogenici -Mice																Carcin ogenici -Rats
4-アミノフェノール 	123-30-8	-	-	+	陰性	陽性	+	+	+	陽性	陽性	-	-	+	-	+	+	陽性	試験なし	-	400	10 ² ~10 ³ t未満 各異性体の合計	硫化染料中間体、ゴム老化防止剤、写真現像薬原料	① 189.6-190.2 ② 284 ③ 0.075 mmHg (20°C)	白色ないし薄茶色の粉末	-	-	-	-	ラットに0.087%の濃度で9ヶ月間混餌投与した発がん実験では、投与に関連した組織への影響はみられなかった。(1948発表)(環境省リスク評価書)	微生物を用いる変異原性試験 陽性(WP2uvrA/pKM101(+,-)、最大比活性値 60.8) ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20=0.00078) ※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)	A		
フタルアルデヒド 	123-72-8	-	-	+	陰性	陽性	+	-	-	陰性	陽性	+	-	-	+	-	-	陰性	試験なし	-	輸出 4,470	記載なし	合成樹脂原料、2-エチルヘキシルアルコール原料、ゴム加硫促進剤	① -99 ② 74.8 ③ 111 mmHg (25°C)	無色液体	-	-	-	-	ヒトへの影響において、「フタルアルデヒド」の暴露は労働者における気道上皮のがんと高温での処理に関する肺がんに関係しているかもしれないが、他の反応性の高いアルデヒド類の暴露可能性もあり、フタルアルデヒド単独の反応かは不明である(PATTY 5th vol.5,2001)とあり、分類できないとした。(厚生労働省GHS分類)	微生物を用いる変異原性試験 陽性(最大比活性値 1000以上) ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20=0.021 Poly) ※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)	A	NTPは13週試験を終えているが報告書は出さないとされている。	
4-(1,1,1,3,3-テトラメチルブチル)フェノール 	140-66-9	-	-	+	陰性	陰性	-	-	-	陰性	陽性	-	-	-	+	-	-	陰性	試験なし	38,039 パラオクチルフェノール	記載なし	17,970	油性フェノール樹脂・界面活性剤原料	① 85.8 ② 279 ③ 0.000478 mmHg (25°C)	白色フレーク状	-	-	-	-	微生物を用いる変異原性試験 陰性 ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20=0.068) ※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)	A			
2,3-ジクロロ-1-プロパノール 	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、火薬中間体、塗料中間体 塗料中間体 出典 NITE初期リスク評価書	① - ② 184 ③ 0.184 mmHg (25°C)	粘性のある液体	-	-	-	-	微生物を用いる変異原性試験 陽性(TA97(+,-), TA98(+,-), TA100(+,-), TA1535(+,-)) (NTP Data Base)	A			
1,3,5-トリス(2,3-エポキシプロピル)ヘキサヒドロ-1,3,5-トリアジン-2,4,6-トリオン 	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化剤)、ソルター(はんた)レジストインク、光半導体封止樹脂、電気部品成形材料・強化プラスチック・接着剤・耐熱レジストインキ・エポキシ樹脂改質材(耐熱性、剛性、硬度、反応性向上)、難燃プラスチックの安定剤 出典 NITE初期リスク評価書	① 95.3 ② - ③ 5.4E-08 mmHg (20°C)	白色固体	-	-	-	-	微生物を用いる変異原性試験 陽性(TA98(+,-), TA100(+,-), TA1535(+,-)、最大比活性値 2640) ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20=0.00013) ※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)	A			
酢酸コバルト(II) (= 水和物) 	6147-53-1	予測不能	予測不能	予測不能	予測不能	陽性	予測不能	予測不能	予測不能	予測不能	陽性	予測不能	予測不能	予測不能	予測不能	予測不能	予測不能	予測不能	試験なし	-	650	記載なし	ワニス塗料乾燥剤、ワニス原料、陶器顔料、液相酸化触媒、アルミニウム表面処理剤、医薬中間体 出典 NITE調査	140°Cで結晶水が失われる	赤紫色結晶または結晶性粉末	-	-	-	-	微生物を用いる変異原性試験 陽性(TA98(-), TA100(-), WP2uvrA/pKM101(-), TA1537(-)、最大比活性値 2580) ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(D20=0.0092) ※既存化学物質変異原性試験データ集補遺4版(JETOC,2008)	A			
次亜塩素酸カルシウム 	7778-54-3	-	Caのため予測不能	+	(擬陽性) 陰性	陽性	+	Caのため予測不能	+	陽性	陰性	-	Caのため予測不能	Caのため予測不能	Caのため予測不能	Caのため予測不能	Caのため予測不能	Caのため予測不能	陰性	試験なし	-	25,000 60%換算	10 ⁴ ~10 ⁵ t未満	漂白剤、殺菌剤、有機・無機薬品原料、殺菌剤(失効農薬)	① 100°Cで分解 ② - ③ -	白色粉末	3	-	IARC 52 (1991) p159-176 Hypochlorite saltsの評価	微生物を用いる変異原性試験 陽性(TA1530(+), TA1535(+)) ほか乳類培養細胞を用いる染色体異常試験 陽性(IARC Vol. 52)	B	本物質は純品としては得がたく、有効塩素濃度で品位を表すのが一般的である。		

(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、輸出品量も有り。
(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)