少量新規化学物質における分解性及び蓄積性評価フローについて(解説)

2026年7月31日

(独)製品評価技術基盤機構
化学物質管理センター 安全審査課

はじめに

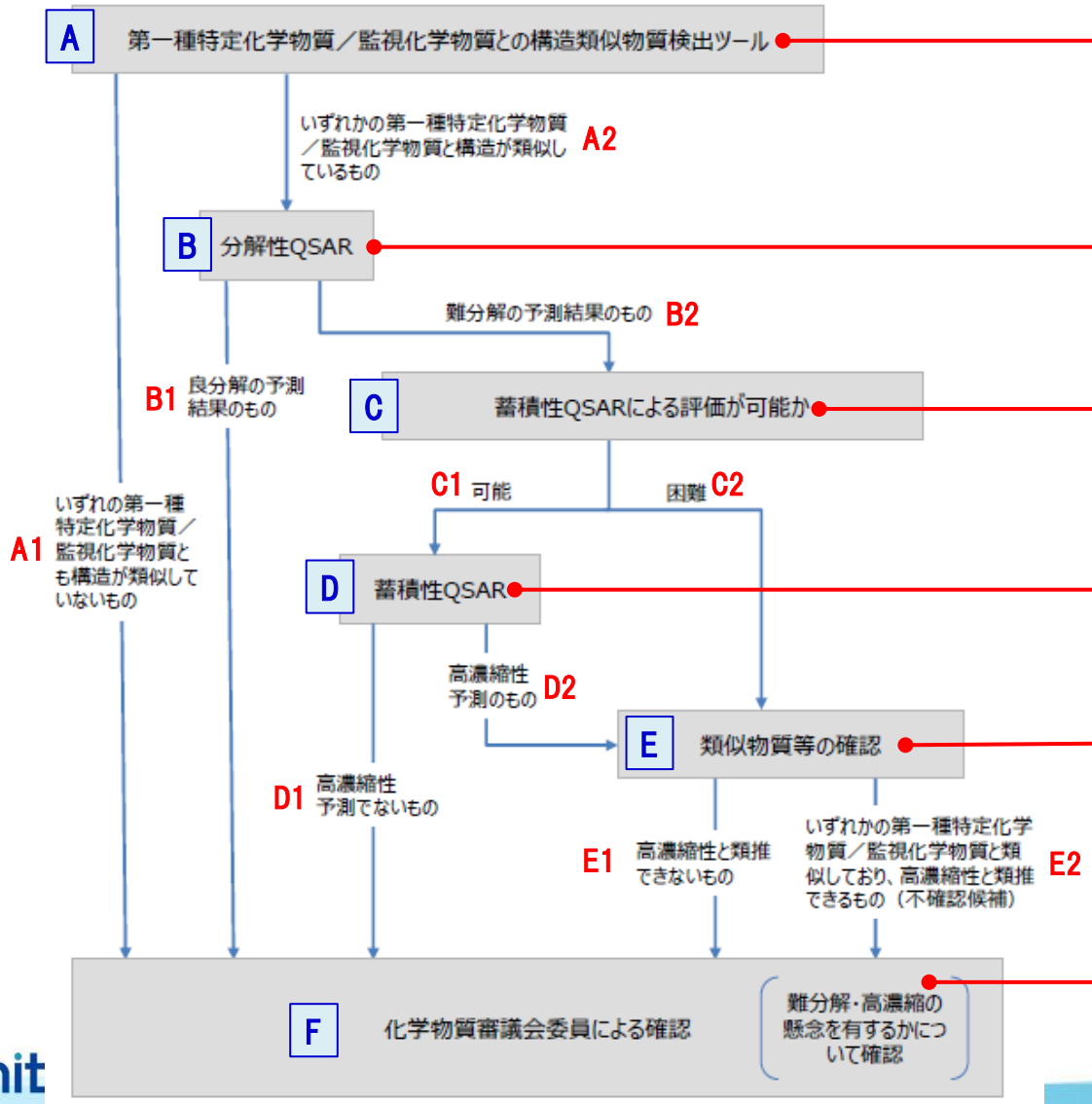
少量新規化学物質については、化審法第3条第1項第5号に基づき、「既に得られている知見等から判断して、その新規化学物質による環境の汚染が生じて人の健康に係る被害又は生活環境動植物の生息若しくは生育に係る被害を生ずるおそれがあるものでない」旨の確認が行われています。

申出のあった少量新規化学物質については、第一種特定化学物質・監視化学物質との構造類似性や、分解性、蓄積性に関する QSAR(定量的構造活性相関)による推計等を踏まえつつ、化学物質審議会委員の意見も聴いた上で、確認を行っています。本資料では、構造類似性を評価する手法や分解性、蓄積性に関するQSAR推計結果の利用方法の詳細について解説します。

※ https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/shinki/buntikukakuninflow.pdf

評価フローの概要

申出された少量新規化学物質については、以下のフローに従って分解性・蓄積性に関して既に得られている知見からの評価を行います。
ただし、本フローは少量新規化学物質製造・輸入申出書の電算処理コード欄①「高分子化合物の記載」及び③「原料の記載」が「1（＝有）」の申出については適用されません。



各ステップの評価方法の詳細については、下記のスライドを参照してください。

A. 一特/監視類似物質検出ツール（スライド4-6）

B. 分解性QSARと予測結果に基づく評価（スライド7）

C. 蓄積性QSARによる評価の可否（スライド8）

D. 蓄積性QSARと予測結果に基づく評価（スライド9）

E. 類似物質等の確認（スライド10-11）

F. 化学物質審議会委員による確認（スライド12）

A. 一特/監視類似物質検出ツール①

一特/監視類似物質検出ツールにより、化学構造から一特/監視物質との類似性が判定されます。

本ツールを使用するためには、OECDが無料で公開しているQSAR Toolboxが必要です。

一特/監視類似物質検出ツールとユーザマニュアルは、下記のウェブサイトから入手してください：

https://www.nite.go.jp/chem/qsar/syouryou_QSAR.html

QSAR Toolboxの入手方法やマニュアル類の和訳は、下記のウェブサイトでご案内しています：

https://www.nite.go.jp/chem/kanren/kokusai_qsar.html#

A. 一特/監視類似物質検出ツール②

一特/監視類似物質検出ツールは、評価対象物質の構造情報を基に以下の4つの項目の判定を行います：

Level 1：一特/監視物質との構造類似性がある（安全サイドの判定）

Level 2：一特/監視物質との構造類似性が高い

Level 3：一特/監視物質に該当する

POPs：POPs対象物質（一特/監視物質でないもの）へ該当する

上記4項目の判定結果の組合せと評価フローとの対応は以下のとおりです：

<table>
<tr><th rowspan="2">ケース</th><th colspan="4">検出ツールの判定結果</th><th rowspan="2">解釈</th><th rowspan="2">評価フロー
との対応</th></tr>
<tr><th>Level 1</th><th>Level 2</th><th>Level 3</th><th>POPs</th></tr>
<tr><td>1</td><td>N/A</td><td>N/A</td><td>N/A</td><td>N/A</td><td>いずれの一特/監視物質とも構造類似性がない。
いずれのPOPs対象物質にも該当しない。</td><td>→A1（不確認となる
可能性は低い）</td></tr>
<tr><td>2</td><td>番号</td><td>N/A</td><td>N/A</td><td>N/A</td><td rowspan="3">番号（L1）の一特/監視グループ※との構造類似性がある。
番号（L2）の一特/監視物質との構造類似性が高い。
番号（L3）の一特/監視物質に該当する。</td><td>→A2
Eに進んだ場合は、特に慎重な精査が必要。</td></tr>
<tr><td>3</td><td>番号</td><td>番号</td><td>N/A</td><td>N/A</td></tr>
<tr><td>4</td><td>番号</td><td>番号</td><td>番号</td><td>N/A</td><td rowspan="2">後続のフロー
によらず不確認</td></tr>
<tr><td>5</td><td colspan="3">（判定結果によらない）</td><td>略称</td><td>略称のPOPs対象物質に該当する。</td></tr>
</table>

※ 次スライド参照

A. 一特/監視類似物質検出ツール③

一特/監視類似物質検出ツールのLevel 1の判定では、化学構造が類似する一特/監視物質をグループ化し、それぞれのグループに対する構造類似性を判定しています。Level 1の判定結果に対応する一特/監視物質のグループは下表のとおりです。

判定結果（グループ番号）	該当する一特/監視物質（ID*）
1	アルドリン(一特4)，ディルドリン(一特5)，エンドリン(一特6)
2	クロルデン又はヘプタクロル
3	トキサフェン(一特12)，エンドスルファン又はベンゾエピン（一特29)
4	マイレックス(一特13)，クロルデコン(一特23)
5	O-（2，4-ジクロロフェニル）＝O-エチル＝フェニルホスホノチオアート(監視9)
6	ポリ塩化ビフェニル（一特1)，ヘキサブロモビフェニル(一特24)，ポリブロモビフェニル(監視11)，ジエチルビフェニル(監視20)，トリエチルビフェニル(監視23)
7A	ＤＤＴ(一特7)，7A）ケルセン又はジコホル（一特14)
7B	ジベンジルトルエン（監視22)
8	テトラブロモジフェニルエーテル（一特25)，ペンタブロモジフェニルエーテル（一特26)，ヘキサブロモジフェニルエーテル（一特27)，ヘプタブロモジフェニルエーテル（一特28)，デカブロモジフェニルエーテル(一特33)
9	ポリ塩化ナフタレン(一特2)，ジイソプロピルナフタレン(監視15)，トリイソプロピルナフタレン(監視16)
10	ヘキサクロロベンゼン(一特3)，ペンタクロロベンゼン(一特19)，1，3，5-トリブロモ-2-（2，3-ジブロモ-2-メチルプロポキシ）ベンゼン（監視8)，ペンタクロロフェノール又はその塩若しくはエステル（一特31)
11	α-ヘキサクロロシクロヘキサン(一特20)，β-ヘキサクロロシクロヘキサン（一特21)，γ-ヘキサクロロシクロヘキサン(一特22)，ペルフルオロ（1，2-ジメチルシクロヘキサン）（監視27)
12	ポリ塩化直鎖パラフィン(一特32)
13	ヘキサクロロブタ-1，3-ジエン(一特15)
14A	ペルフルオロヘプタン(監視34)，ペルフルオロオクタン(監視35)
14B	ＰＦＯＳ又はその塩(一特17)，ＰＦＯＳＦ(一特18)，ＰＦＯＡ(一特34)，ペルフルオロドデカン酸(監視29)，ペルフルオロトリデカン酸(監視30)，ペルフルオロテトラデカン酸(監視31)，ペルフルオロペンタデカン酸(監視32)，ペルフルオロヘキサデカン酸(監視33)
15	ペルフルオロ（1，2-ジメチルシクロヘキサン）（監視27)，2，2，3，3，4，4，5-ヘプタフルオロ-5-（ペルフルオロブチル）オキソラン(監視36)
16	ビス（トリブチルスズ）＝オキシド(一特9)

判定結果（グループ番号）	該当する一特/監視物質（ID*）
17	テトラフェニルスズ（監視7)
18	N，N'-ジトリル-パラ-フェニレンジアミン、N-トリル-N'-キシリル-パラ-フェニレンジアミン又はN，N'-ジキシリル-パラ-フェニレンジアミン(一特10)
19A	2，4，6-トリ-ターシャリ-ブチルフェノール（一特11)，1-ｔｅｒｔ-ブチル-3，5-ジメチル-2，4，6-トリニトロベンゼン(監視2)，1，3，5-トリ-ｔｅｒｔ-ブチルベンゼン(監視10)，4-ｓｅｃ-ブチル-2，6-ジ-ｔｅｒｔ-ブチルフェノール(監視37)
19B	2，6-ジ-ｔｅｒｔ-ブチル-4-フェニルフェノール(監視14)，2，2'，6，6'-テトラ-ｔｅｒｔ-ブチル-4，4'-メチレンジフェノール(監視28)
20	2，4-ジ-ｔｅｒｔ-ブチル-6-［（2-ニトロフェニル）ジアゼニル］フェノール(監視26)
21	2-（2H-1，2，3-ベンゾトリアゾール-2-イル）-4，6-ジ-ｔｅｒｔ-ブチルフェノール(一特16)，2，4-ジ-ｔｅｒｔ-ブチル-6-（5-クロロ-2H-1，2，3-ベンゾトリアゾール-2-イル）フェノール(監視18)，2-（2H-1，2，3-ベンゾトリアゾール-2-イル）-6-ｓｅｃ-ブチル-4-ｔｅｒｔ-ブチルフェノール(監視25)
22	N，N-ジシクロヘキシル-1，3-ベンゾチアゾール-2-スルフェンアミド(監視24)
23	1，4-ビス（イソプロピルアミノ）-9，10-アントラキノン(監視38)
24	水素化テルフェニル(監視21)
25	ジペンテンダイマー又はその水素添加物(監視12)
26	シクロドデカン（監視4)，シクロドデカ-1，5，9-トリエン(監視3)，ヘキサブロモシクロドデカン(一特30)
27	2-イソプロピルビシクロ［4．4．0］デカン又は3-イソプロピルビシクロ［4．4．0］デカン(監視13)
28	1，1-ビス（ｔｅｒｔ-ブチルジオキシ）-3，3，5-トリメチルシクロヘキサン（監視6)
29	α-（ジフルオロメチル）-ω-（ジフルオロメトキシ）ポリ［オキシ（ジフルオロメチレン）／オキシ（テトラフルオロエチレン）］(監視39)
30	オクタメチルシクロテトラシロキサン(監視40)，ドデカメチルシクロヘキサシロキサン(監視41)
31	酸化水銀（II）（監視1)

*J-CHECK（https://www.nite.go.jp/chem/jcheck/top.action?request_locale=ja）による

B. 分解性QSARと予測結果に基づく評価

分解性QSARにより、化学構造から分解性が予測されます。評価フローで使用している3つのQSARとその入手先は下記のとおりです：

EPI Suite: BIOWIN5 および BIOWIN6 (無料):
https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/download-epi-suitetm-estimation-program-interface-v411

CATALOGIC (OECD 301C) (市販品):
http://oasis-lmc.org/products/software/catalogic.aspx
購入方法と価格については、下記にお問い合わせください：
http://oasis-lmc.org/about/contacts.aspx

各ソフトウェアの使用方法については、ソフトウェアに付属のマニュアルを参照してください。上記QSARの予測結果と評価フローの対応は下表のとおりです：

QSAR予測結果の分類		
BIOWIN5	BIOWIN6	CATALOGIC
0.5以上 （良分解性）		BOD分解度60%以上 （良分解性）
0.5未満 （難分解性）		BOD分解度60%未満 （難分解性）

評価フローの分類	
QSAR予測結果	分類
良分解性と予測したQSARが2つ以上	良分解性予測 （→B1）
良分解性と予測したQSARが2つ未満	難分解性予測 （→B2）

各分解性QSARの特徴については、スライド15,17を
BIOWIN5, BIOWIN6の出力結果についてはスライド18を参照してくだい。

C. 蓄積性QSARによる評価の可否

一特/監視類似物質の一部については、蓄積性QSARによる評価が難しい傾向があることが確認されています(実測が高濃縮性でQSAR予測が低濃縮性であった物質等)。

そのような一特/監視物質の類似物質については、蓄積性QSAR(D)の予測結果によらず、類似物質の確認(E)がおこなわれます。

一特/監視類似物質検出ツールのLevel 1の判定で用いた物質のグループ(スライド6)のうち、以下の番号のものが蓄積性QSARによる評価が困難な物質群として扱われます(→C2):

3, 6, 8, 10, 11, 12, 13, 14B, 16, 19A, 19B, 20, 22, 23, 24, 25, 29, 30, 31

上記の番号以外の物質のグループは、蓄積性QSARによる評価が可能な物質群として扱われます(→C1)。

D. 蓄積性QSARと予測結果に基づく評価

蓄積性QSARにより、化学構造から蓄積性が予測されます。評価フローで使用している3つのQSARとその入手先は下記のとおりです：

EPI Suite: BCFBAF および Arnot-Gobas model (無料):
https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/download-epi-suitetm-estimation-program-interface-v411

CATALOGIC Base-line model (市販品):
http://oasis-lmc.org/products/software/catalogic.aspx
購入方法と価格については、下記にお問い合わせください：
http://oasis-lmc.org/about/contacts.aspx

各ソフトウェアの使用方法については、ソフトウェアに付属のマニュアルを参照してください。上記QSARの予測結果と確認フローとの対応は下表のとおりです：

QSAR予測結果の分類		
BCFBAF*[1]	Arnot-Gobas*[2]	Baseline model
BCF1000未満(logBCF3未満)		
BCF1000以上(logBCF3以上)		

＊1：regression-based estimate
＊2：lower trophic

評価フローの分類	
QSAR予測結果	分類
BCF1000以上と予測したQSAR が2つ未満	高濃縮性予測でない(→D1)
BCF1000以上と予測したQSAR が2つ未満	高濃縮性予測(→D2)

各蓄積性QSARの特徴については、スライド16,17を
BCFBAF, Arnot-Gobasモデルの出力結果についてはスライド19を参照してくだい。

E. 類似物質等の確認①

評価対象物質の構造類似物質の蓄積性試験データ等、評価対象物質の蓄積性に関する既知見情報を調査・確認します。

その結果、評価対象物質が、いずれかの一特/監視物質に構造が類似しており、高濃縮性と類推※できると評価されたものが、不確認候補として取り扱われます(→E2)。

評価対象物質が、いずれかの一特/監視物質に構造が類似していても、高濃縮性と類推できないもの(例えば、より類似性の高い低濃縮性の物質があった場合など)については、不確認候補として取り扱われません(→E1)。

※ 類推は、エキスパートジャッジに基づくデータギャップ補完の手法で、化学物質のグルーピングに関するOECDのガイダンス文書(ENV/JM/MONO(2014)4)に記載されているリードアクロスやカテゴリーアプローチと称される手法に対応する評価手法です。

NITEでは、事業者の方々の類推評価技術の向上を支援するための講習会を開催すると共に類推評価に関する個別のご相談を随時受け付けています(https://www.nite.go.jp/chem/qsar/qsartop.html)。

類推の考え方については、次のスライドで解説します。

E. 類似物質等の確認②

評価物質との構造上の差異が小さい物質を類似物質とみなします。構造類似度等を用いて類似物質の明確な基準を一律に定めることは困難ですが、スライド5に示した一特/監視類似物質検出ツールで、評価対象物質と同じ結果が出力される物質を類似物質の候補とみなすことができます。

一特/監視類似物質検出ツール(Level2)では、類似度80%(QSAR Toolboxのデフォルト)以上を「一特監視物質との構造類似性が高い」ことの基準に用いています。該当する物質は、この過程において特に慎重な評価を行うことを推奨します。

類推の有効性は物質の種類により多様であるため、全ての物質に対して一律に明確な判定基準を定めることはできません。類推の主な観点を下記に示します。

- 高濃縮性の物質と低濃縮性の物質のどちらにより類似しているか？
- 評価対象物質の高濃縮性/低濃縮性の類似物質に対する構造上の差異は、濃縮性の促進と阻害のどちらに寄与するか(脂溶性、分子サイズ、代謝性等)？

類推による類似物質等の確認については、
事前相談を受けることができます(スライド13)。

F. 化学物質審議会委員による確認

A～Eによる分類結果を化学物質審議会委員に提供し、難分解・高濃縮の懸念を有するかについて意見聴取します。

相談窓口

評価フローに関する技術的な内容の相談については、下記にお問い合わせください。

（独）製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター 安全審査課（TEL: 03-3481-1812）

お問合せは、下記の化審法連絡システムをご利用ください：

https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/kashinrenraku.html

（一般問合せ→お問合せ分類：少量新規化学物質における分解性・蓄積性の評価フローに関するお問合せ）

＜対応可能な相談の例＞

- 検出ツール/QSARのインストール方法、使用方法に関する質問
- 類推による類似物質等の確認についての事前相談

制度に関することなど政策的な内容の相談については、経済産業省にお問合せください。

https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/todoke/shinki_shoryo_index.html

補足資料

各分解性QSARの特徴

① BIOWIN5、BIOWIN6[1)]

化審法生分解性試験条件下(OECD301C法)において、BOD分解度が60%以上となる確率を連続変数で予測。42の部分構造及び分子量を記述子とし、BIOWIN5では線形回帰式、BIOWIN6では非線形の回帰式により予測がなされる。

② CATALOGIC[2),3)]

OECD TG301Cにおける、28日後のBOD分解度、分解経路、親物質及び変化物の残留率を予測することができる。部分構造一致による代謝シミュレータにより予測がなされる。

1) J. Tunkel et al., *Environ. Toxicol. Chem.* **19** (2000) 2478.
2) J. Jaworska et al., *SAR QSAR Environ. Res.* **13** (2002) 323.
3) N. H. Dimitrova et. al, *SAR QSAR Environ. Res.* **28** (2017) 511.

BIOWIN5とBIOWIN6の予測結果は一致することが多いが、BIOWIN5は、BIOWIN6よりフッ素化合物の分解性を過剰に見積もる傾向にある。

BIOWIN5とBIOWIN6は、酸素原子の多い化合物(複数のエステル基を有する化合物等)の分解性を過剰に見積もる傾向にある。

各蓄積性QSARの特徴

① BCFBAF[1)]

logPowを記述子とした直線回帰式(一部補正項あり)からlogBCFを算出。

② Arnot-Gobasモデル[2)]

化学物質の取込、代謝による消失、排泄の速度等による物質収支モデルによりlogBCFを算出。

③ Baseline Model[3)]

logPowを記述子とした受動拡散を表す式から、logBCF(最大値)を算出。logBCF(最大値)から代謝や分子サイズの影響等による濃縮性の低下を補正しlogBCF(補正値)を算出。

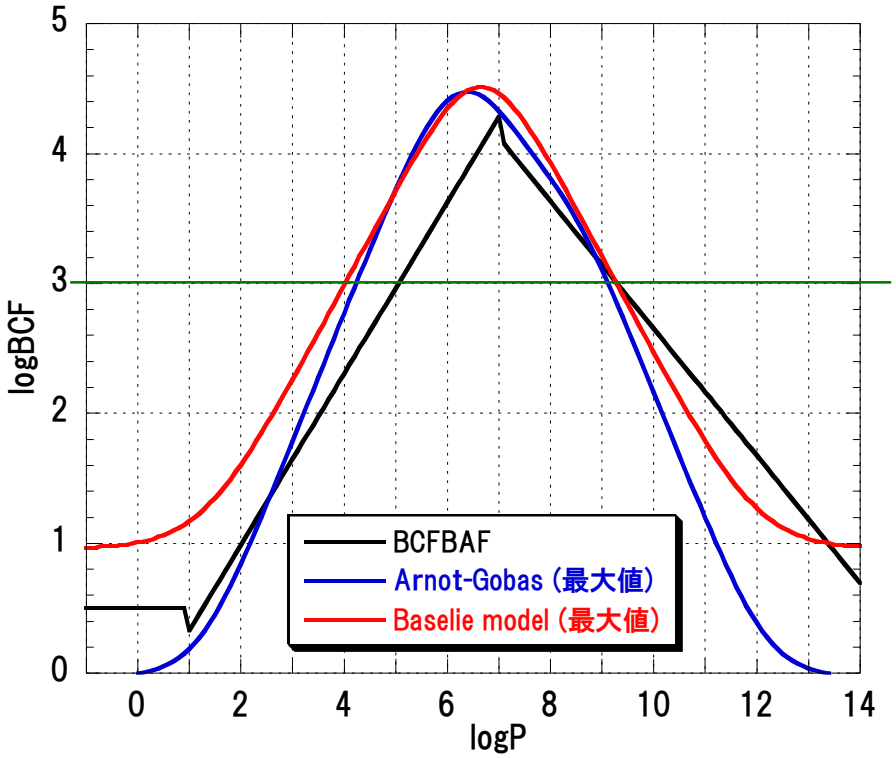


図. 各蓄積性QSARのlogP-logBCFの関係

上図の関係においてlogPから求めたlogBCFから、Arnot-Gobasモデルは、代謝の影響が差し引かれ、Baseline modelは、代謝、分子サイズ、解離性の影響が差し引かれる。

Baseline modelのBCFは、代謝の影響が大きく反映される場合が多く、BCFBAFのBCFより小さく予測される傾向にある。

1) W. M. Meylan et al., *Environ. Toxicol. Chem.* **18** (1999) 664.
2) S. Dimitrov et al., *SAR QSAR Environ. Res.* **16** (2005) 31.
3) J. Arnot and F. Gobas, *QSAR Comb. Sci.* **22** (2003) 337.

QSARの正答率について

評価フローで使用するQSARの正答率は下表のとおりです。

これらの正答率は、任意の有機低分子量化合物の化審法試験データ(新規/既存)より算出しています。

正答率は算出に用いるデータセットにより変わりますので、これらの正答率は、あくまでも目安として参考にしてください。

図. 分解性QSARの正答率

	難分解性予測		良分解性予測	
	正答率※1	誤答率	正答率※2	誤答率
BIOWIN5	91%	9%	53%	48%
BIOWIN6	90%	10%	58%	42%
CATALOGIC	94%	6%	77%	23%

※1 難分解性と予測された物質のうち実測で難分解性だった物質の割合

※2 良分解性と予測された物質のうち実測で良分解性だった物質の割合

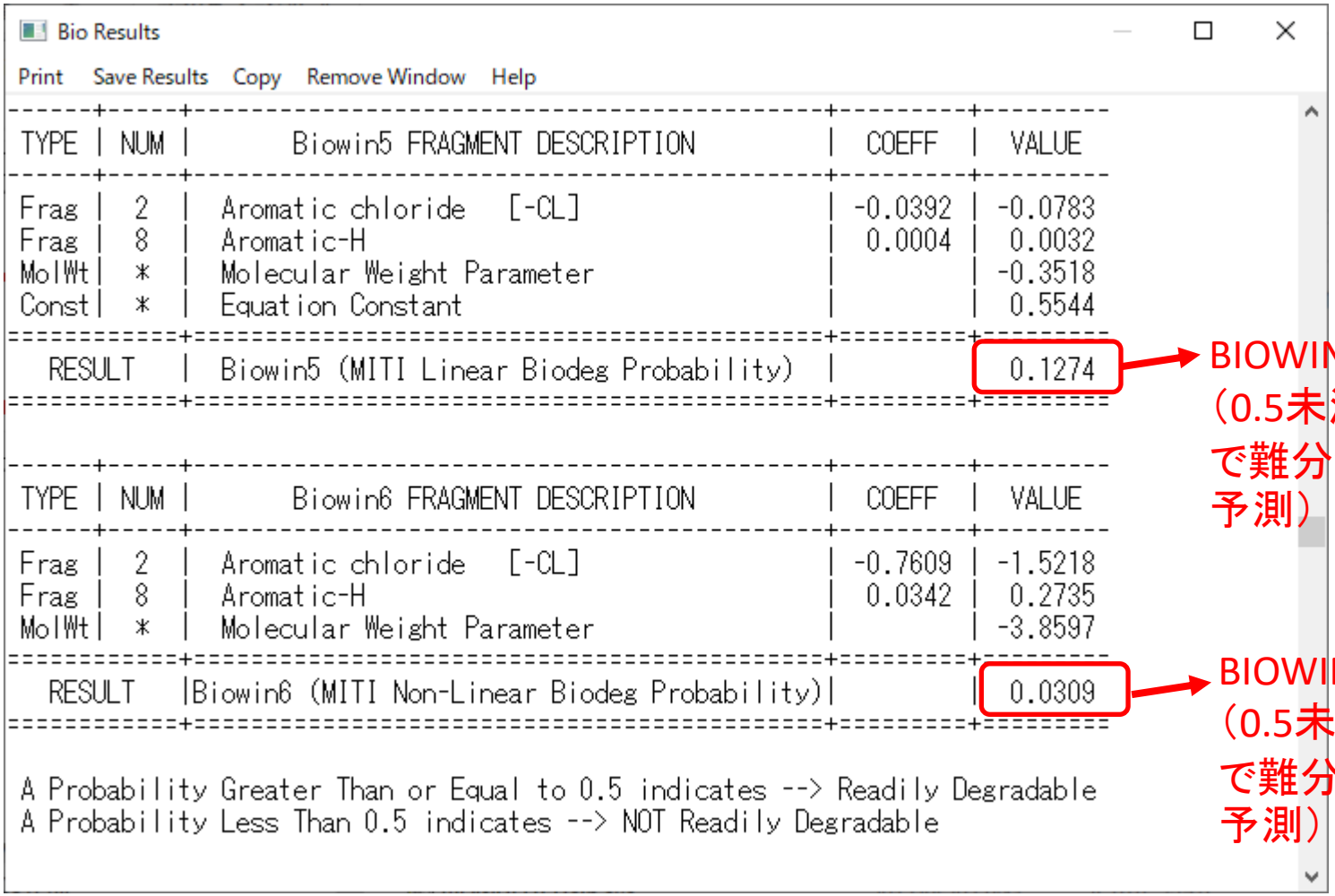
図. 蓄積性QSARの正答率

	BCF≥1000予測		BCF<1000予測	
	正答率※1	誤答率	正答率※2	誤答率
BCFBAF	27%	73%	95%	5%
Arnot-Gobas	37%	63%	96%	4%
Baseline model	43%	57%	93%	7%

※1 BCF≥1000と予測された物質のうち実測でBCF≥1000だった物質の割合

※2 BCF<1000と予測された物質のうち実測でBCF<1000だった物質の割合

BIOWIN5、BIOWIN6の出力結果



Bio Results

Print Save Results Copy Remove Window Help

TYPE	NUM	Biowin5 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	2	Aromatic chloride [-CL]	-0.0392	-0.0783
Frag	8	Aromatic-H	0.0004	0.0032
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.3518
Const	*	Equation Constant		0.5544
RESULT		Biowin5 (MITI Linear Biodeg Probability)		0.1274

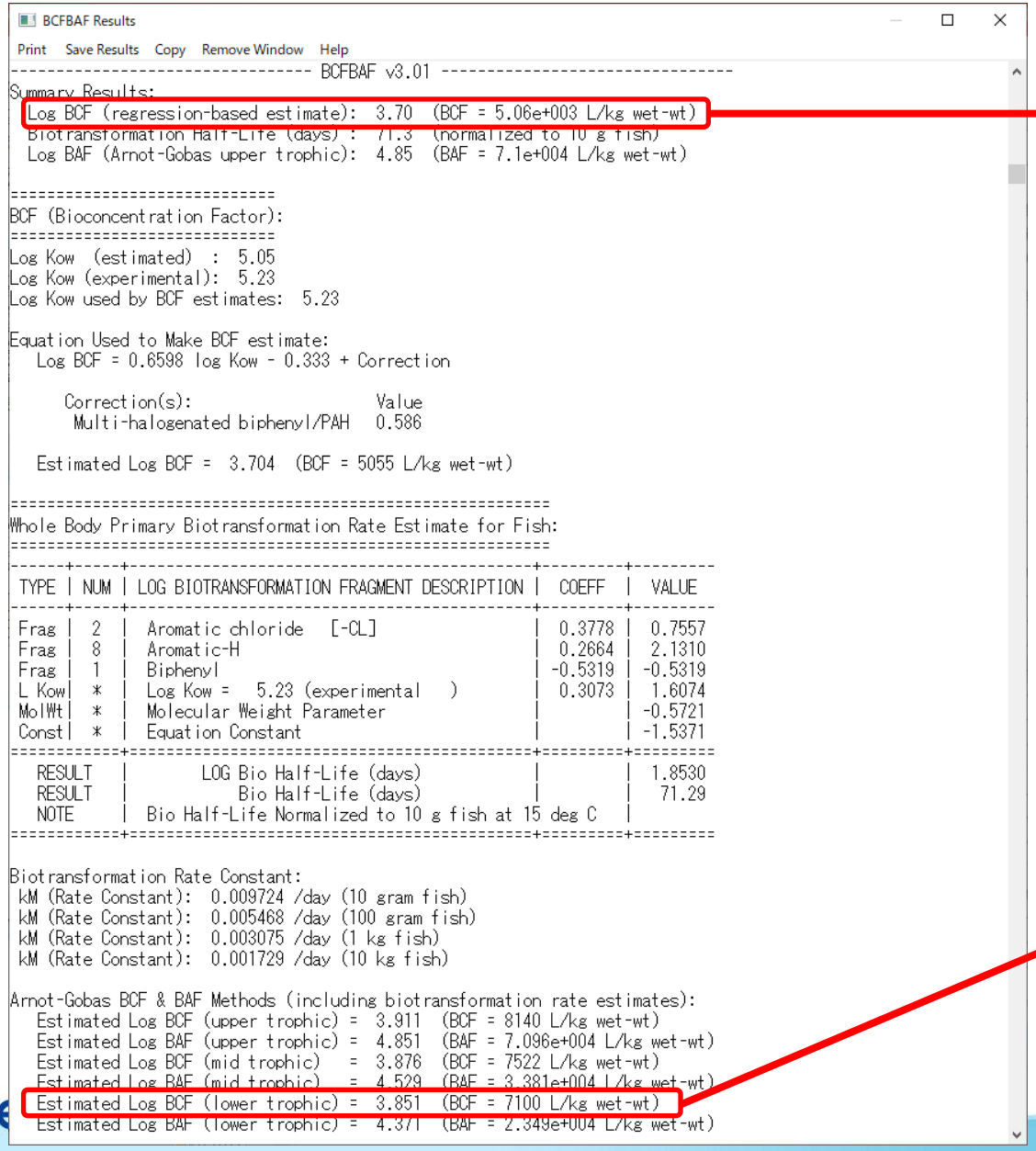
TYPE	NUM	Biowin6 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	2	Aromatic chloride [-CL]	-0.7609	-1.5218
Frag	8	Aromatic-H	0.0342	0.2735
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-3.8597
RESULT		Biowin6 (MITI Non-Linear Biodeg Probability)		0.0309

A Probability Greater Than or Equal to 0.5 indicates --> Readily Degradable
A Probability Less Than 0.5 indicates --> NOT Readily Degradable

BIOWIN5（0.5未満なので難分解性予測）

BIOWIN6（0.5未満なので難分解性予測）

BCFBAF、Arnot-Gobs modelの出力結果



BCFBAF Results

Print Save Results Copy Remove Window Help

```
---------------------------------- BCFBAF v3.01 -------------------------------
Summary Results:
  Log BCF (regression-based estimate):  3.70  (BCF = 5.06e+003 L/kg wet-wt)
  Biotransformation Half-Life (days) :  71.3  (normalized to 10 g fish)
  Log BAF (Arnot-Gobas upper trophic):  4.85  (BAF = 7.1e+004 L/kg wet-wt)

============================
BCF (Bioconcentration Factor):
============================
Log Kow  (estimated)  :  5.05
Log Kow (experimental):  5.23
Log Kow used by BCF estimates:  5.23

Equation Used to Make BCF estimate:
   Log BCF = 0.6598 log Kow - 0.333 + Correction

      Correction(s):                  Value
       Multi-halogenated biphenyl/PAH  0.586

   Estimated Log BCF =  3.704  (BCF = 5055 L/kg wet-wt)

=========================================================
Whole Body Primary Biotransformation Rate Estimate for Fish:
=========================================================
------+-----+-----------------------------------------+---------+---------
 TYPE | NUM | LOG BIOTRANSFORMATION FRAGMENT DESCRIPTION |  COEFF  |  VALUE
------+-----+-----------------------------------------+---------+---------
 Frag |  2  |  Aromatic chloride   [-CL]              |  0.3778 |  0.7557
 Frag |  8  |  Aromatic-H                             |  0.2664 |  2.1310
 Frag |  1  |  Biphenyl                               | -0.5319 | -0.5319
 L Kow|  *  |  Log Kow =   5.23 (experimental   )     |  0.3073 |  1.6074
 MolWt|  *  |  Molecular Weight Parameter             |         | -0.5721
 Const|  *  |  Equation Constant                      |         | -1.5371
============+=========================================+=========+=========
   RESULT   |        LOG Bio Half-Life (days)         |         |  1.8530
   RESULT   |            Bio Half-Life (days)         |         |   71.29
   NOTE     |  Bio Half-Life Normalized to 10 g fish at 15 deg C  |
============+=========================================+=========+=========

Biotransformation Rate Constant:
 kM (Rate Constant):  0.009724 /day (10 gram fish)
 kM (Rate Constant):  0.005468 /day (100 gram fish)
 kM (Rate Constant):  0.003075 /day (1 kg fish)
 kM (Rate Constant):  0.001729 /day (10 kg fish)

Arnot-Gobas BCF & BAF Methods (including biotransformation rate estimates):
   Estimated Log BCF (upper trophic) =  3.911  (BCF = 8140 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BAF (upper trophic) =  4.851  (BAF = 7.096e+004 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BCF (mid trophic)   =  3.876  (BCF = 7522 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BAF (mid trophic)   =  4.529  (BAF = 3.381e+004 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BCF (lower trophic) =  3.851  (BCF = 7100 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BAF (lower trophic) =  4.371  (BAF = 2.349e+004 L/kg wet-wt)
```

BCFBAFの予測結果:
logBCF=3.70
BCF=5060

Arnot-Gobas モデルの予測結果:
logBCF=3.851
BCF=7100