

OECD QSAR Toolbox 活用 マニュアル

～ データのインポートと構造検索 ～

Ver. 1.0

The logo for 'nite' is displayed in a bold, blue, lowercase sans-serif font. A small blue dot is positioned above the letter 'i'.

平成26年9月

独立行政法人 製品評価技術基盤機構

免責事項

本マニュアルを使用したことにより、直接的、間接的に発生した損害、損失については、いかなる責任も負いかねます。

改訂履歴

Version	日付	改訂内容
Ver. 1.0	平成 26 年 9 月	初版

このマニュアルは OECD QSAR Toolbox 3.2 における操作について解説したものです。
他のバージョンでは同じ操作が行えない可能性があります。

目次

1	データのインポート	3
1.1	インポートするデータ表の作成.....	3
1.2	QSAR Toolbox へのインポート	4
2	物質検索 — 指定した分子構造を含む物質を検索	14
2.1	使用する DB の選択.....	14
2.2	検索する構造の入力.....	15
2.3	データの収集.....	20
3	物質検索 — 類似の分子構造を持つ物質を検索.....	22
3.1	使用する DB の選択.....	22
3.2	検索する分子構造の入力.....	23
3.3	類似物質の検索とデータの収集.....	26
4	詳細データの確認.....	30

1 データのインポート

1.1 インポートするデータ表の作成

Microsoft Excel 等で表を作成します。

1 行目にタイトル、2 行目以降にデータという形式の表にします。

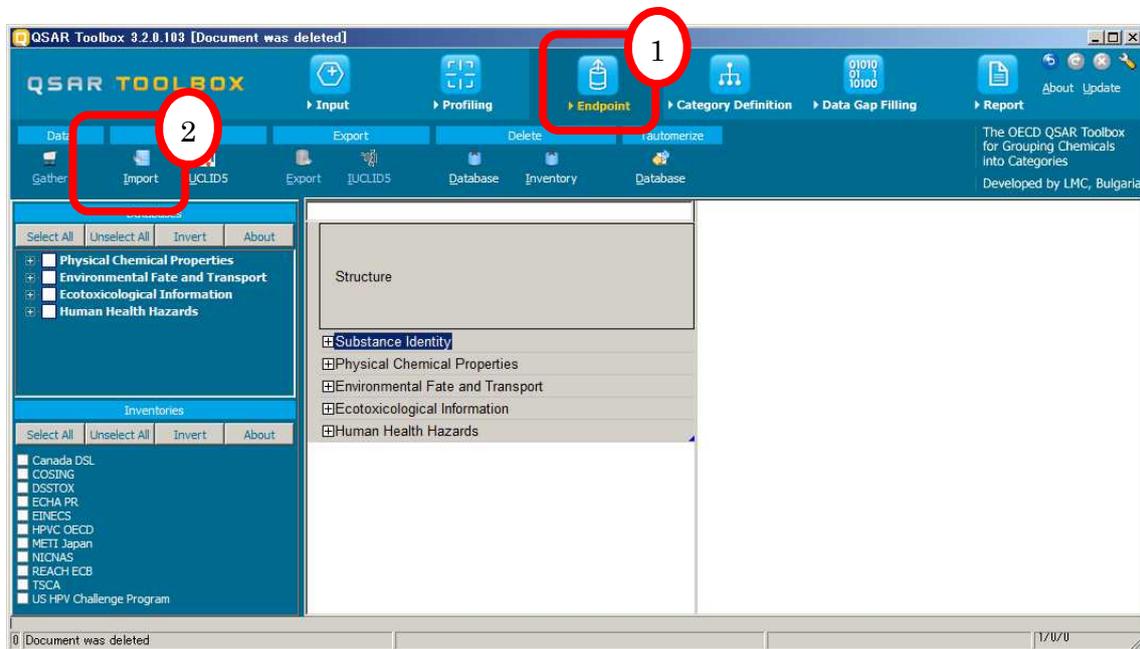
今回は「nite_newchemical_bcf_h16-19.xlsx」というファイルから上部 4 行を削除し、
下図のような表を作成します。

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	官報公示整理番号	CAS	官報公示名称	SMILES	試験方法	エンドポイント	値(※1)	試験に用いた物質名称(※2)
2	2-4094	-	ナトリウム=2, 2, 4, 4, 5, 5, 7, 7, 8, 8, 8-ウンデカ	FC(F)C(F)OC(F)C(O)N	TG305	BCF	≤5.8	
3	5-6891	35554-44-0	1-[2-(アシルオキシ)-2-(2,4-ジクロロフェニル)	C=CCOC(=O)C(=O)C	TG305	BCF	63.8	
4	4-1934	-	4,4'- (4-インプロピル-1-メチルシクロヘキサン	CC1(C)C(C)C(C)C(C)C2	TG305	BCF	132	
5	3-4597	3848-51-9, 18995-02-3	ジフェニル=(フェニルアミド)ホスファートを主成分(90%	O=P(O)C(=O)C(=O)C1=NC	TG305	BCF	72	
6	4-1933	16611-67-9	(2,5-ジクロロフェニル)(フェニル)メタン	O=C(C)C(=O)C(=O)C2=C	TG305	BCF	77	
7	5-6893	875-35-4	2,6-ジクロロ-4-メチルニコチノトリル	CC1=CC(C)=NC(C)=C1C#	TG305	BCF	3.9	
8	5-6924	-	ジメチル=イミダゾール-4,5-ジカルボキシラート	O=C(O)C1=C(C)C(O)=O)N	TG305	BCF	<5.9	
9	5-6894	250786-57-3	ジアゾ[ビス(1,4-ジオキサスピロ[4,5]デカレン-7-オ	O=S(C)CC2(O)CCO2)CC1	TG305	BCF	<27	
10	4-1948	-	ヘプタナトリウム=2-((1-アミノ-8-ヒドロキシ-7-	OC1=C2C(C=C(C=C2)/N)N	TG305	BCF	<3	
11	4-1949	-	オクタナトリウム=2-((2-アミノ-6-ヒドロキシ-6-	OC1=C2C(C=C(C=C2)/N)N	TG305	BCF	≤39	
12	2-4055	132182-92-4	1, 1, 1, 2, 3, 4, 4, 5, 5, 5-デカフルオロ-3-メチ	COc1c(F)c(F)c(F)c(F)c1	TG305	BCF	2600	
13	5-6931	-	テトラナトリウム=4-(6-スルホナト-2H-ナフト[1,	O=S(C)C1=CC2=NNC3=CC=C	TG305	BCF	<3.3	
14	3-4598	731-27-1	N-((ジクロロ(フルオロ)メチル)スルファニル)-N'	OC1=CC=C(C=C1)NS(=O)C	assessment Gu	BCF	89	
15	3-4620	-	4-(メチルカルボニル)フェニル=2,4,5-トリメチ	CCOC1=C(C)C(OC)C=C1C	TG305	BCF	<1.8	
16	5-6950	-	2-(3-[3-(6-tert-ブチル-7-クロロ-1H-ピ	CC(C)C1=NN2C(NC)C3=C	TG305	BCF	65	
17	3-4600	3279-07-0	4-tert-ブチル-2-ヒドロフェノール	OC1=C(C=C(C)C)C(C)C	TG305	BCF	58	
18	2-4106	-	1-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロピル-1-イル]尿	NC(N)CCNC(C)C=O.CN(C)C	TG305	BCF	2.3	

ファイルを保存して閉じます。

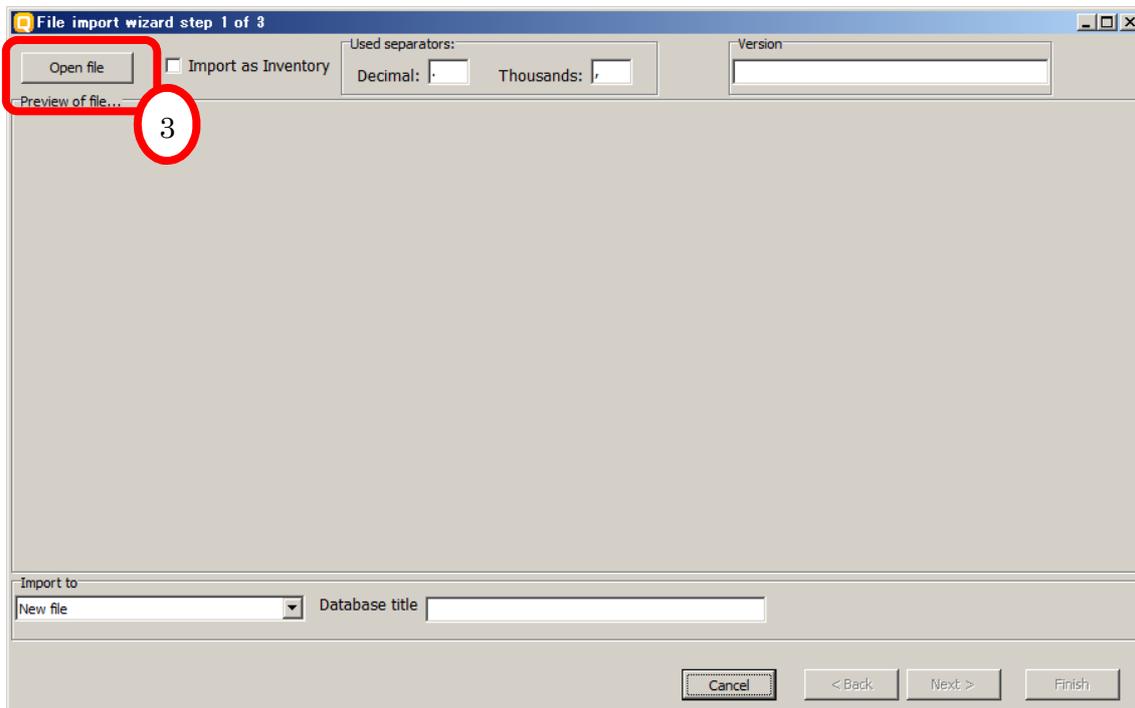
1.2 QSAR Toolbox へのインポート

QSAR Toolbox を起動します。



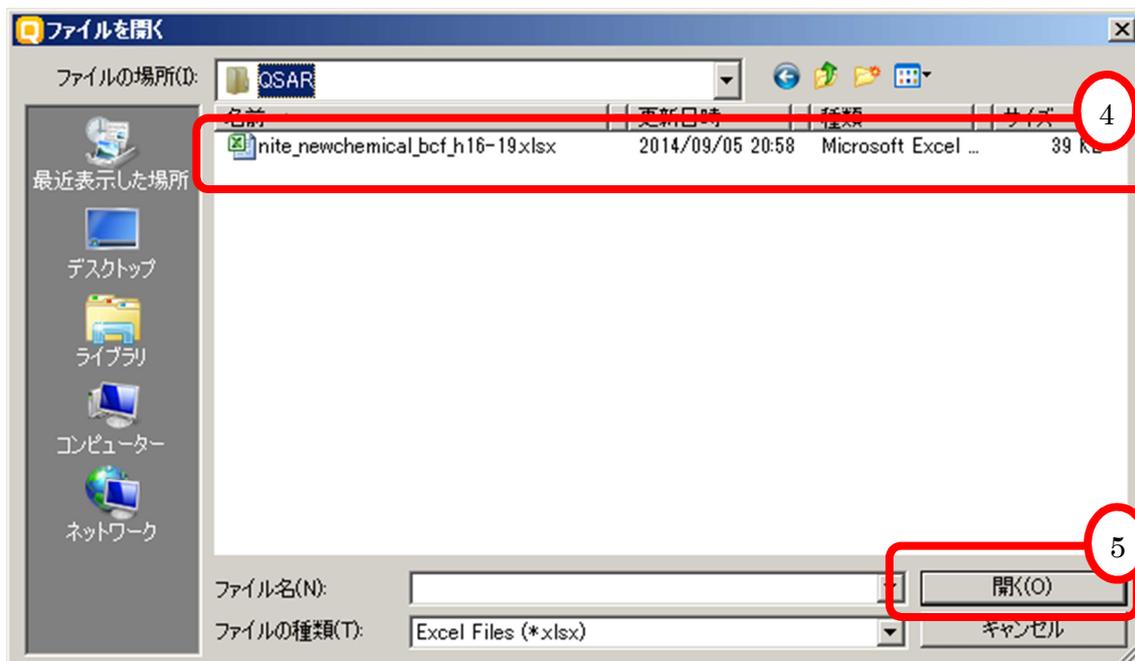
1. “Endpoint” を選択します。
2. “Import” を選択します。

“File import step 1 of 3” というウィンドウが表示されます。



3. “Open file” を選択します。

ファイル選択ウィンドウが開きます。(ファイル選択ウィンドウは、OSの種類・バージョンによって見た目が異なる場合があります。)



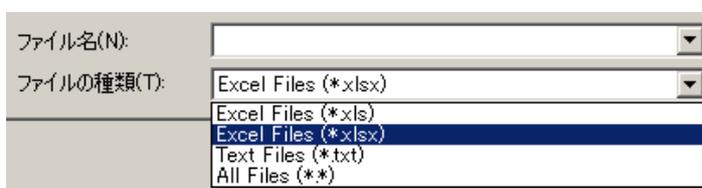
4. 1.1 で作成したファイルを選択します。

5. “開く”を選択します。

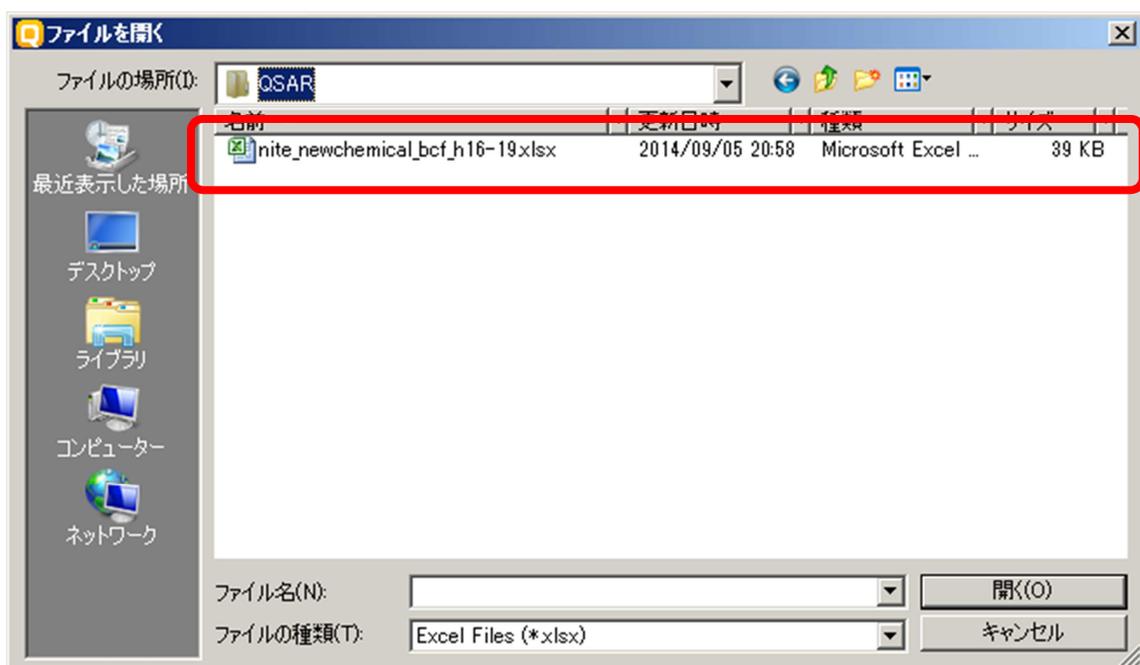
※1 ファイル選択ウィンドウに 1.1 で作成したファイルが表示されない場合



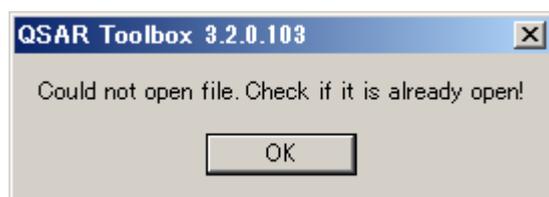
”ファイルの種類”を”Excel Files (*.xlsx)”又は”All Files (*.*)”に変更します。



1.1 で作成したファイルが表示されました。

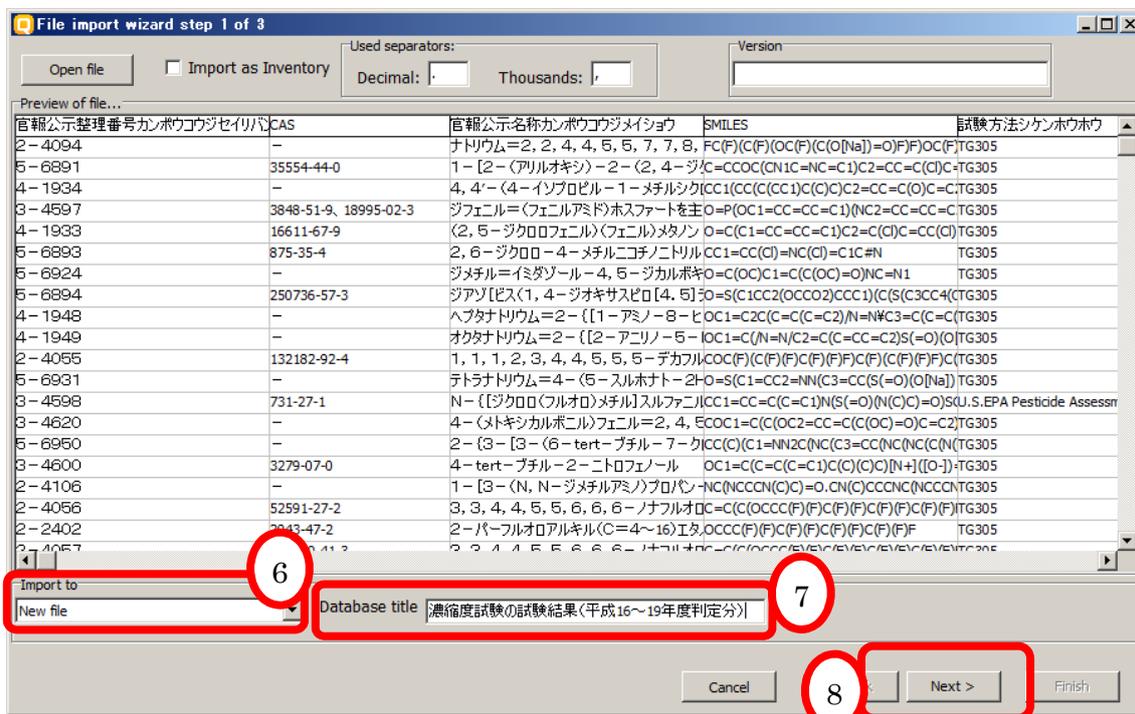


※2 次のアラートが表示された場合



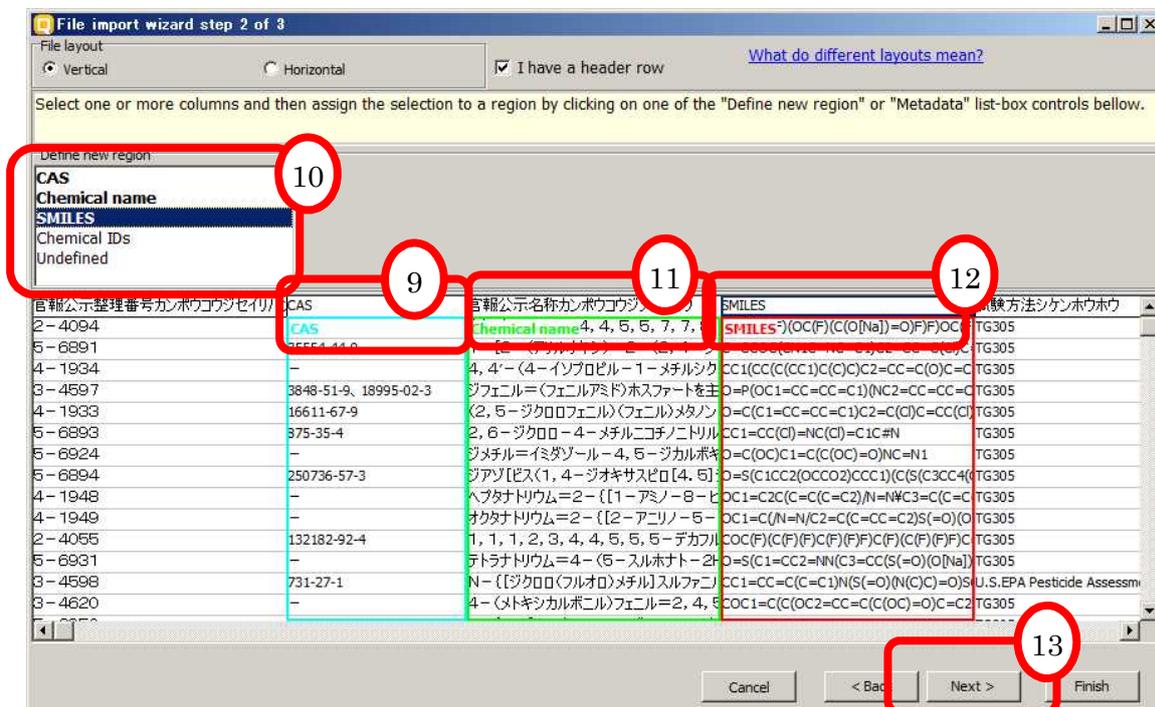
1.1 で作成したファイルがすでに他のソフトで開かれています。該当するファイルを閉じて、” Open file” からやり直してください。

ファイルが正常に読み込まれると、次のような画面が表示されます。



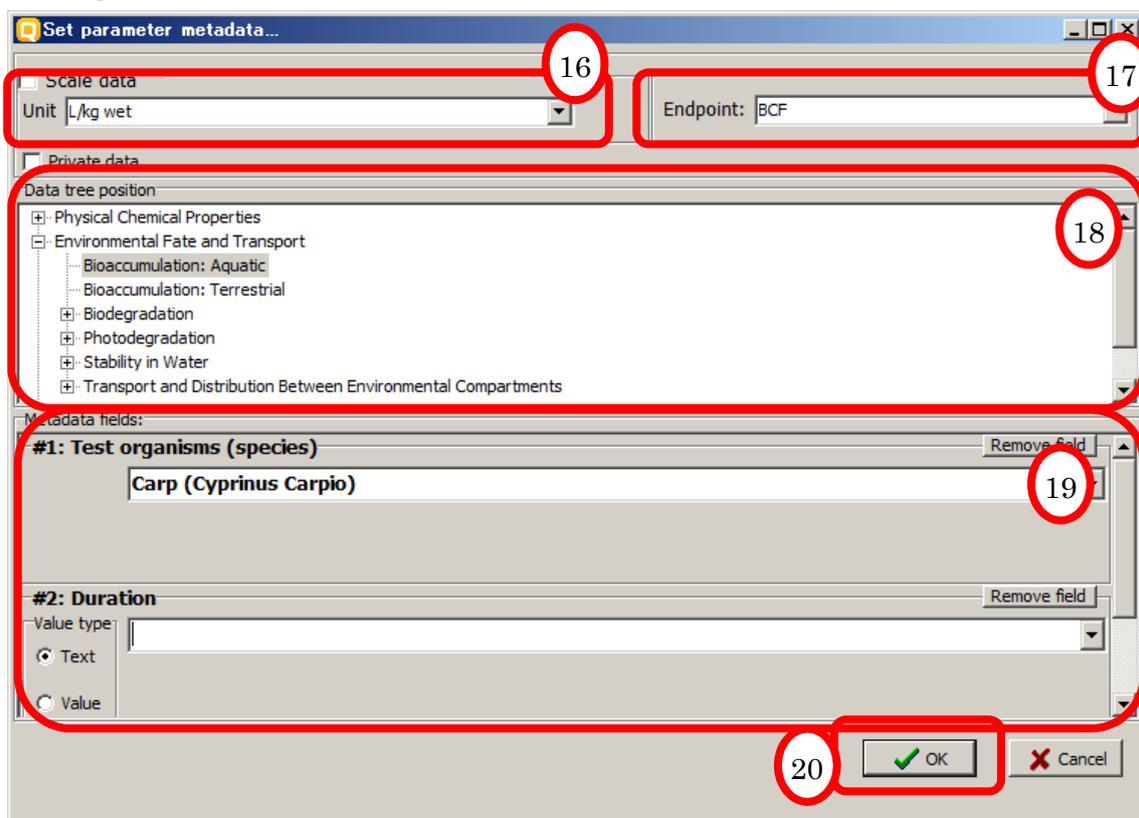
6. “Import to” の項目に “New file” を選択します。
7. “Database title” にデータベース名を入力します。
今回は “濃縮度試験の試験結果 (平成 16~19 年度判定分)” と入力します。
8. “Next >” を選択します。

“File import step 2 of 3” というウィンドウが表示されます。

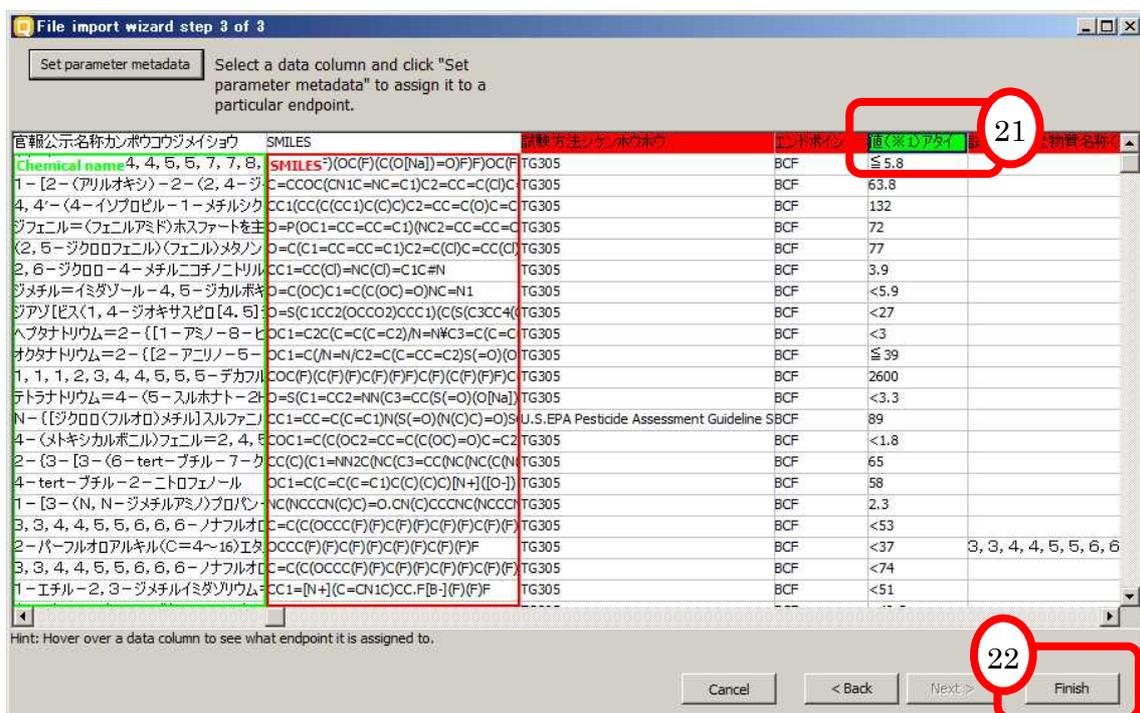


9. 読み込んだデータの CAS の入力されている列を選択します。
10. “Define new region” から、“CAS” を選択します。
11. “官報公示名称” の列を選択し、“Define new region” から “Chemical name” を選択します。
12. “SMILES” の列を選択し、“Define new region” から “SMILES” を選択します。
13. “Next >” を選択します。

“Set parameter metadata” というウィンドウが表示されます。



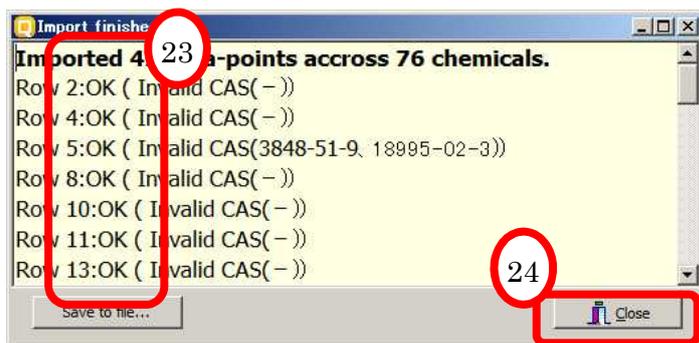
16. “Scale Data” の “Unit” の欄からインポートする値の単位を選択します。
今回は” L/kg wet” を選択します。
※ 最初の数文字を入力すると、候補が表示され選択しやすくなります。
17. “Endpoint” の欄からインポートするデータのエンドポイントを選択します。
今回は” BCF” を選択します。
※ 最初の数文字を入力すると、候補が表示され選択しやすくなります。
18. “Data tree position” から今回登録するデータがデータツリー中のどこにあたるかを選択します。
今回は” Environmental Fate and Transport” の” Bioaccumulation: Aquatic” を選択します。
19. “Metadata fields” に試験条件などを入力します。
今回は” Test organisms (species)” から” Carp (Cyprinus Carpio)” (コイ) を選択します。
※ 最初の数文字を入力すると、候補が表示され選択しやすくなります。
“Duration” は試験期間を入力しますが、今回は試験期間の異なる結果が混ざっているため入力しません。
20. “OK” を選択します。



21. エンドポイントの値が正常に指定されると、“値”のセルが緑色で表示されます。
22. ”Finish”を選択します。

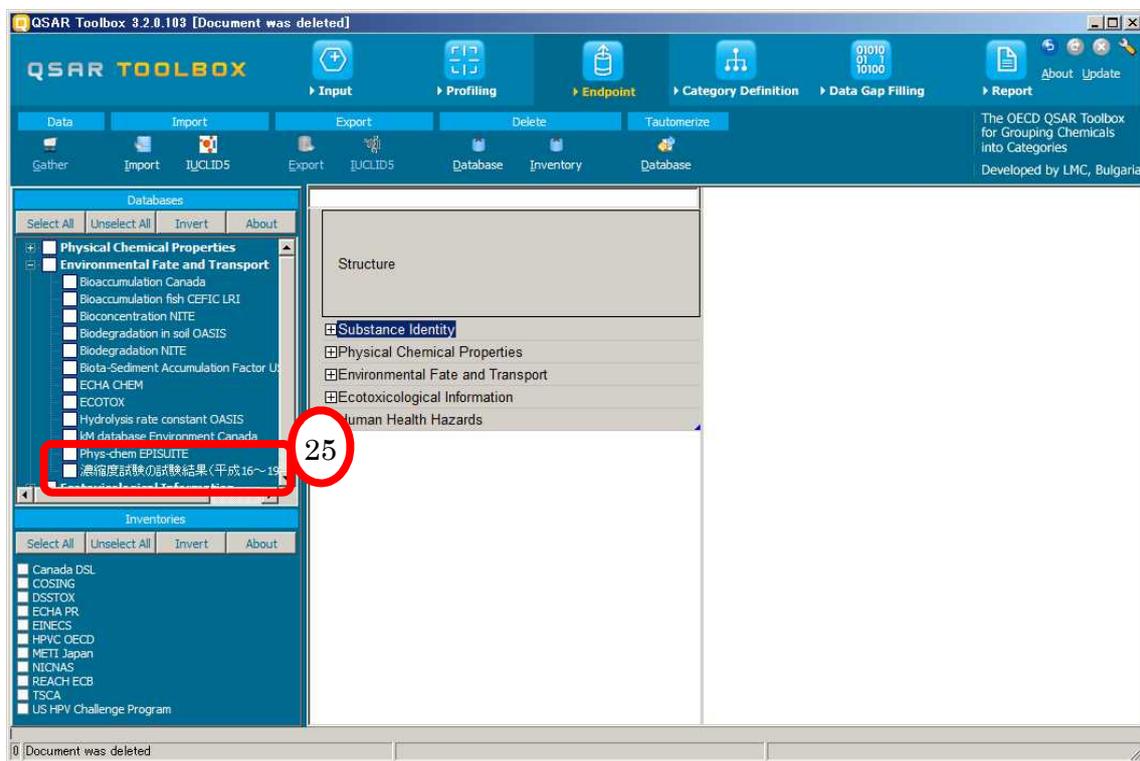
データがインポートされるまで、少々お待ちください。

CASが入力されていない物質等についてのレポートが表示されます。



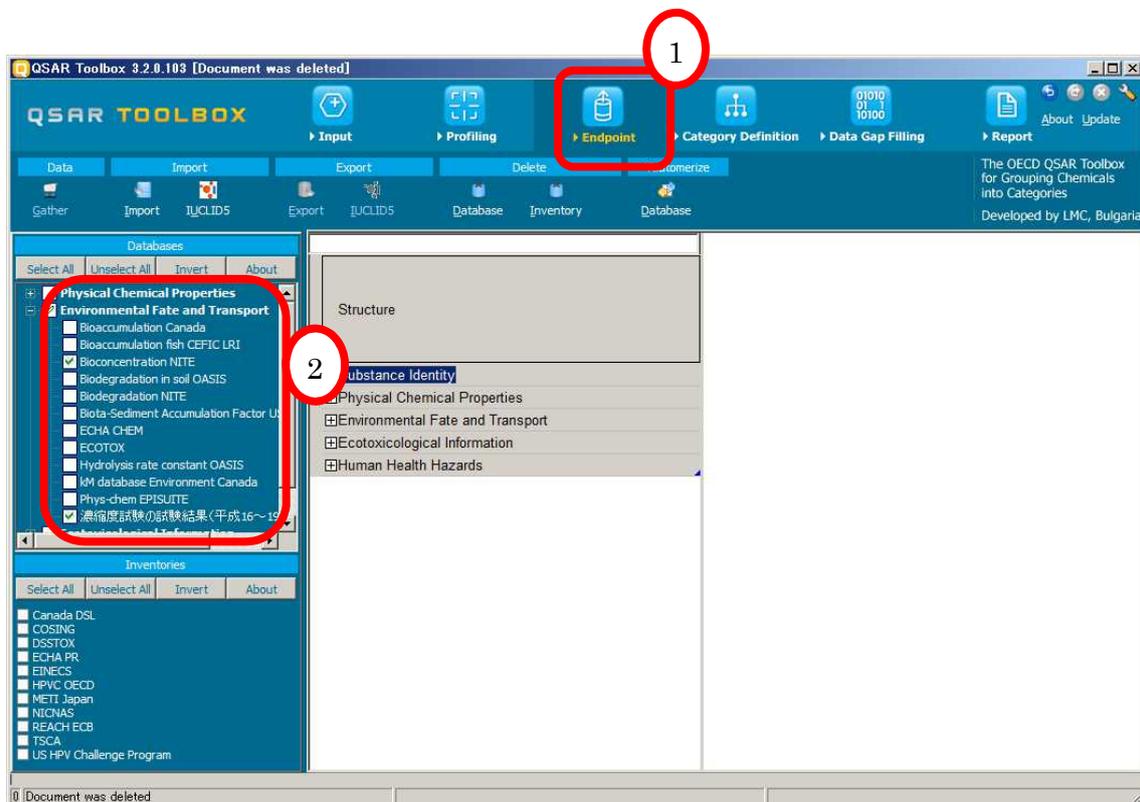
23. “OK”は、そのデータは正しくインポートされたことを示しています。（“NG”が表示された場合は、その行のデータが正しく読み込まれず、その行がスキップされたことを示します。）
24. “Close”を選択し、ウィンドウを閉じます。

25. “Endpoint” の “Databases” の欄に、“濃縮度試験の試験結果（平成 16～19 年度判定分）” が追加されたことが確認できます。



2 物質検索 — 指定した分子構造を含む物質を検索

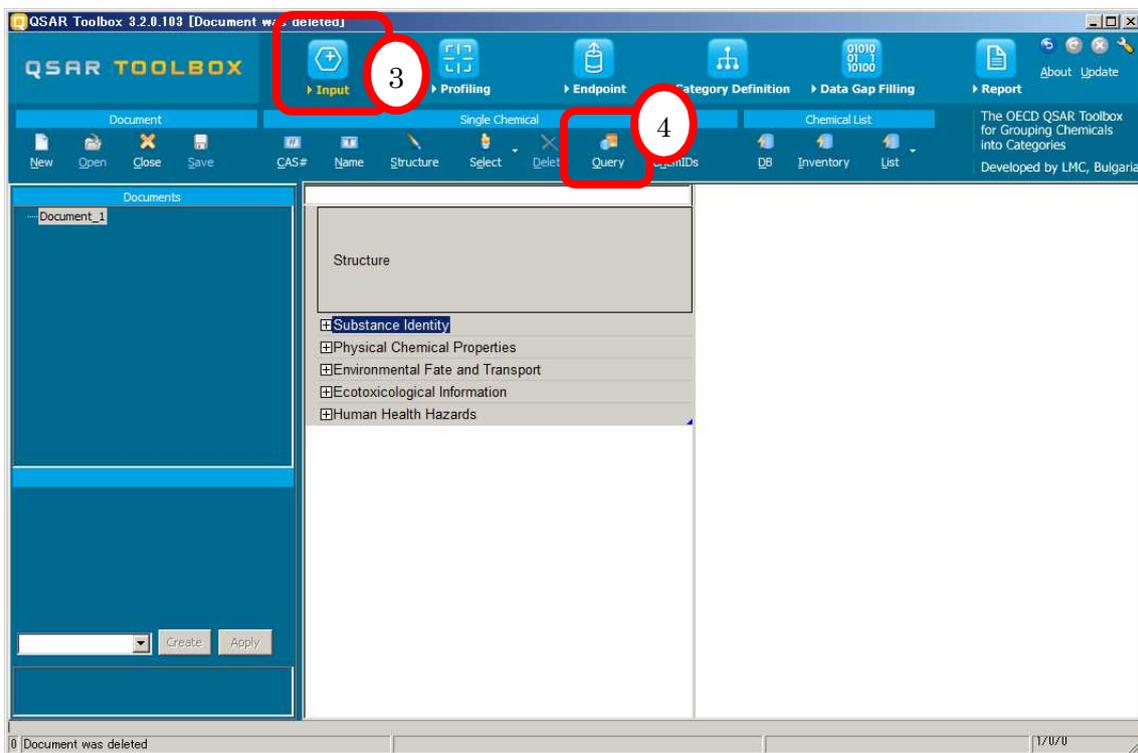
2.1 使用する DB の選択



1. “Endpoint”を選択します。
2. “Databases”の中から、使用するデータベースを選択します。
今回は、“Environmental Fate and Transport”の下にある“Bioconcentration NITE”と“濃縮度試験の試験結果（平成16～19年度判定分）”（「1 データのインポート」でインポートしたDB）を選択します。

※“Bioconcentration NITE”は、NITE から OECD に提供した化審法既存化学物質の蓄積性データです。

2.2 検索する構造の入力



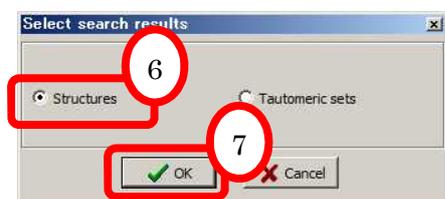
3. "Input"を選択します。
4. "Query"を選択します。

"Query tool"というポップアップが表示され、
「選択したデータベースとインベントリのみから検索しますがよろしいですか」
という意味のメッセージが表示されます。



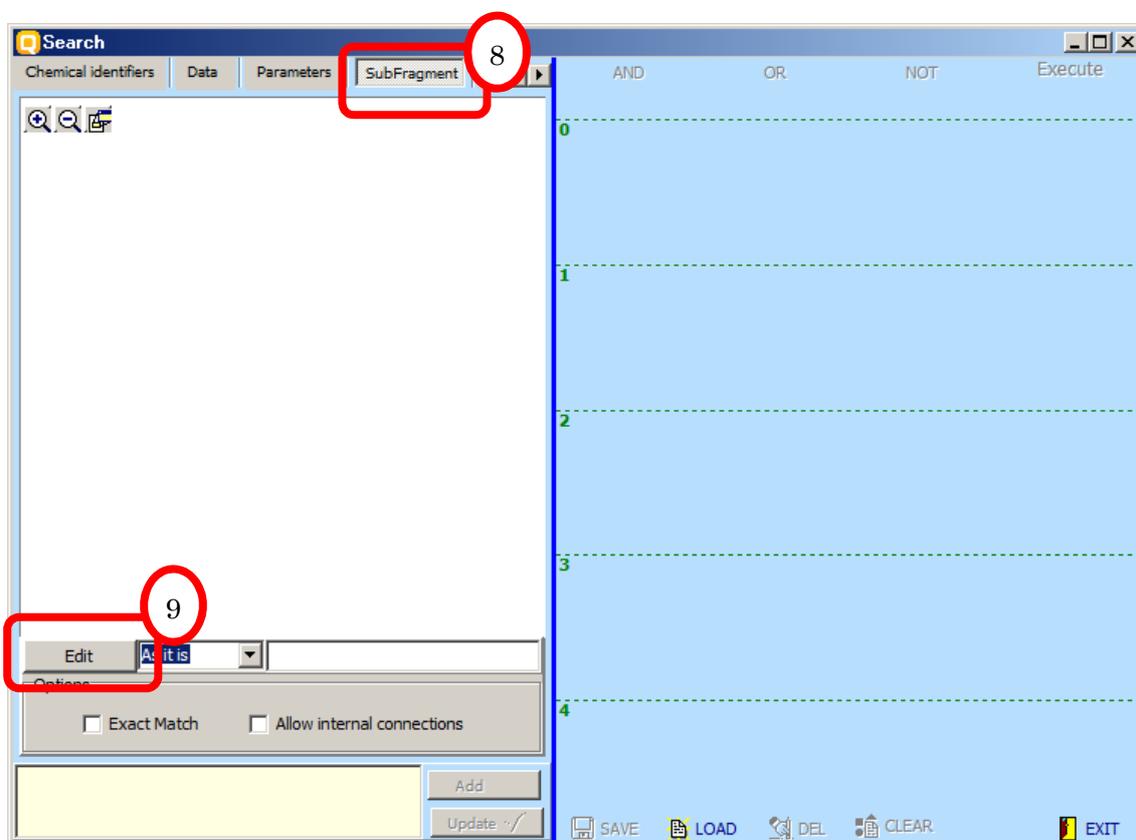
5. "OK"を選択します。

“Select search results”というポップアップが表示されます。



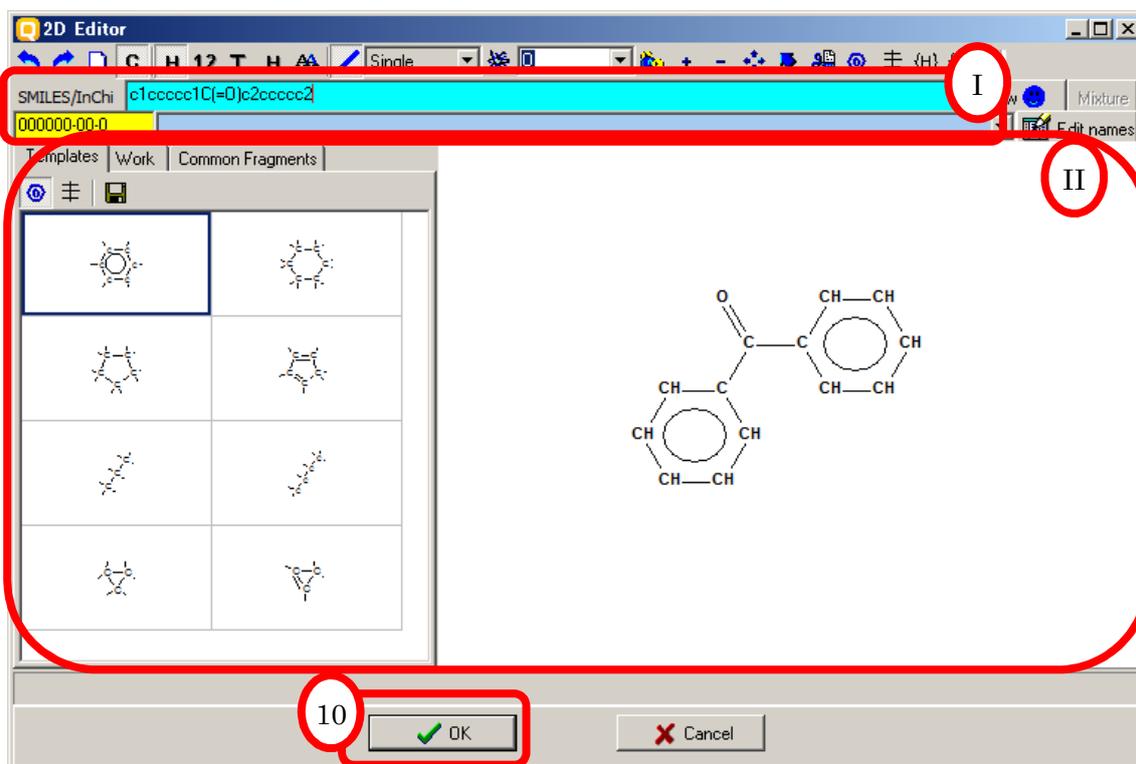
6. “Structures”（構造）を選択します。
7. “OK”を選択します。

“Search”というウィンドウが表示されます。



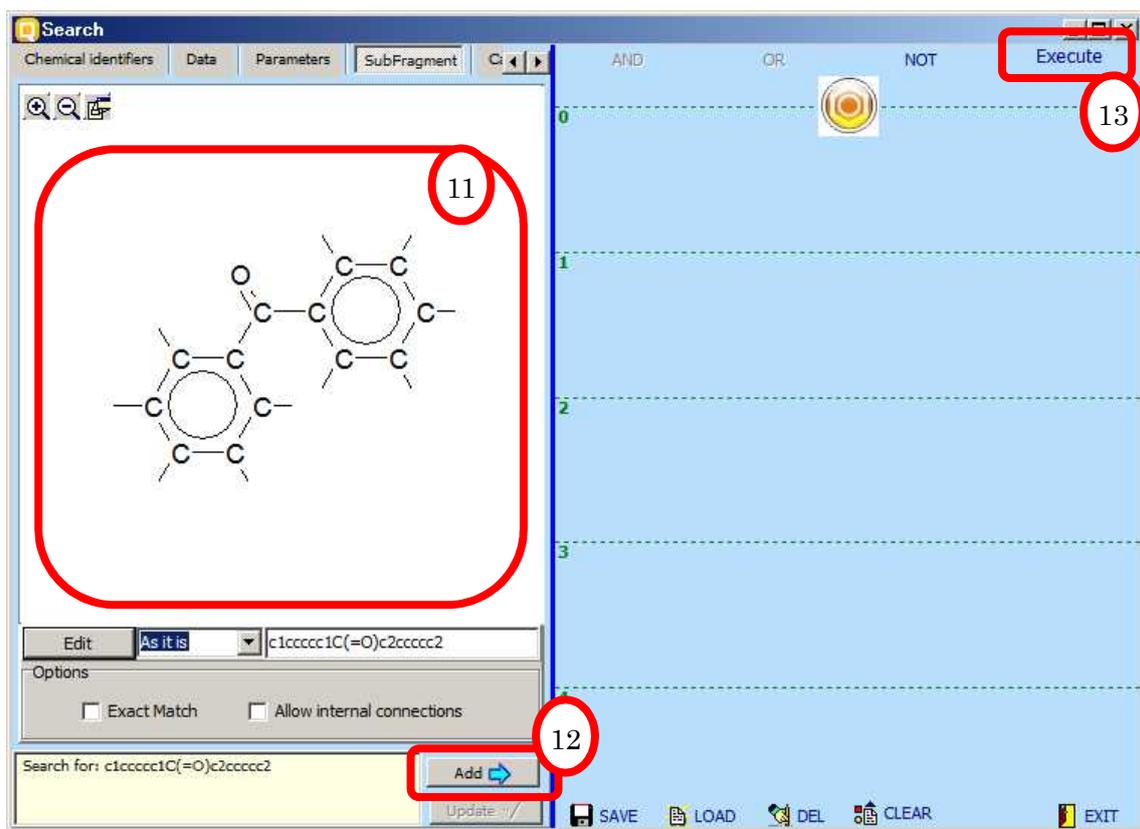
8. “SubFragment”を選択します。
9. “Edit”を選択します。

“2D Editor”というウィンドウが表示されます。



検索する部分構造を次のいずれかの方法で入力します。

- I. 構造式を描くことができます。
 - II. SMILES で入力することができます。
10. “OK”を選択します。



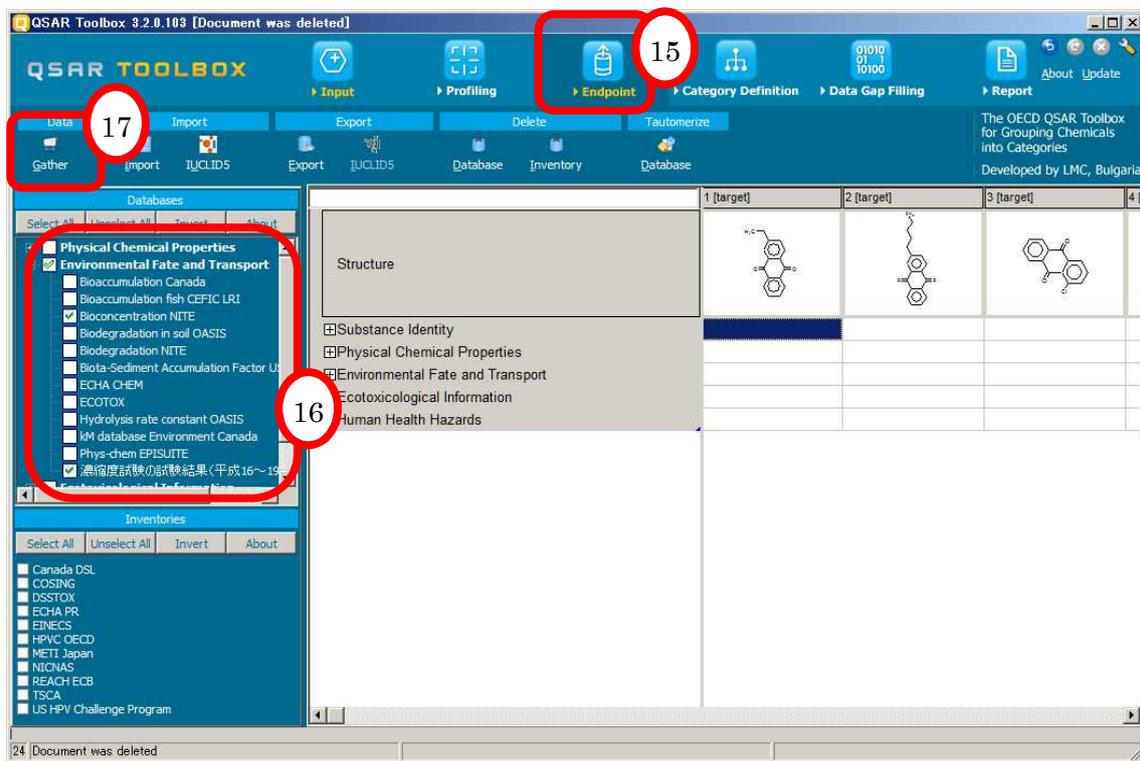
11. 入力した構造が表示されます。
12. "Add"を選択します。
13. "Execute"を選択します。

14. 検索結果が表示されます。

The screenshot shows the QSAR Toolbox 3.2.0.103 interface. The main window displays search results for 24 chemicals. The results are presented in a table with columns for chemical structures and target information. The table has four columns labeled '1 [target]', '2 [target]', '3 [target]', and '4 [target]'. The first row shows three chemical structures. Below the table, there is a section for 'Structure' and a list of categories: Substance Identity, Physical Chemical Properties, Environmental Fate and Transport, Ecotoxicological Information, and Human Health Hazards. The number '14' is circled in red in the bottom right corner of the table area.

1 [target]	2 [target]	3 [target]	4 [target]
			14

2.3 データの収集



15. “Endpoint”を選択します。

16. “Databases”から使用する DB が選択されていることを確認します。

今回は、“Environmental Fate and Transport”の下にある“Bioconcentration NITE”と“濃縮度試験の試験結果(平成16~19年度判定分)”(「1 データのインポート」でインポートした DB) を選択します。

17. “Gather”を選択します。

“Data”というポップアップが表示され、

「選択したデータベースからのみデータを引用します」

という意味のメッセージが表示されます。



18. “OK”を選択します。



引用するデータの範囲を選択します。

I. 今回は、“All endpoints”を選択します。

II. 今回は、“from Tautomers”にチェックを入れます。

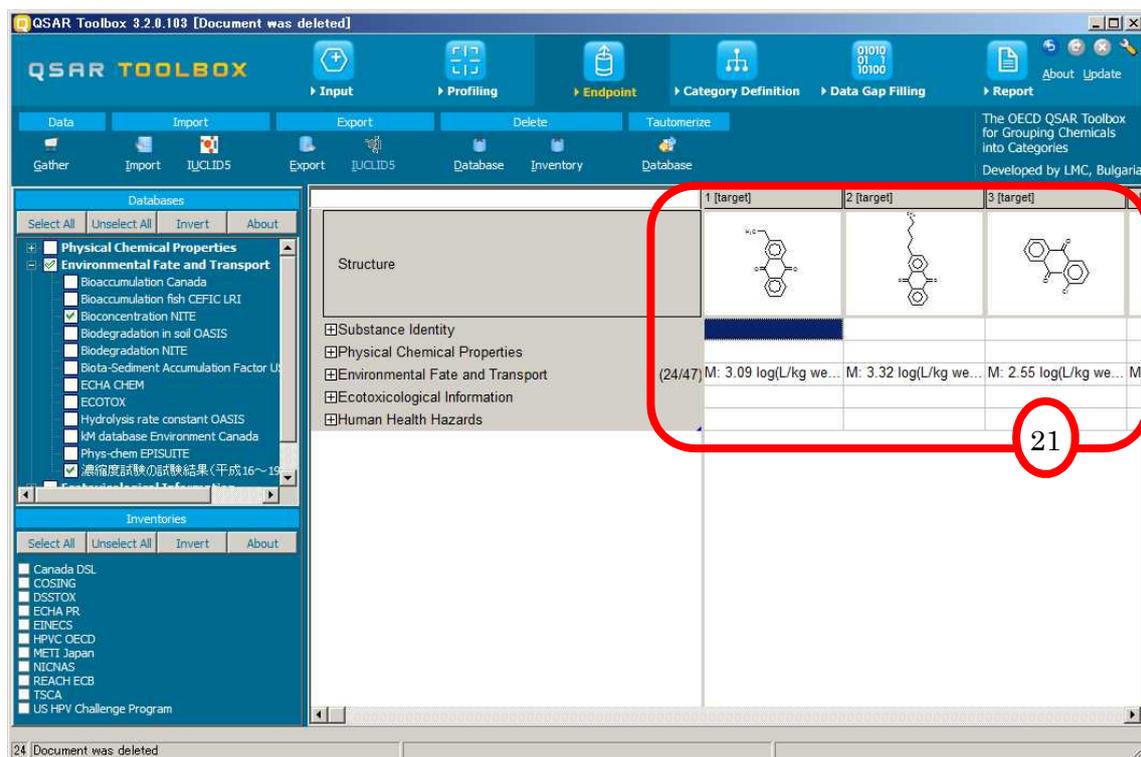
19. “OK”を選択します。

“QSAR Toolbox”というポップアップが表示されます。



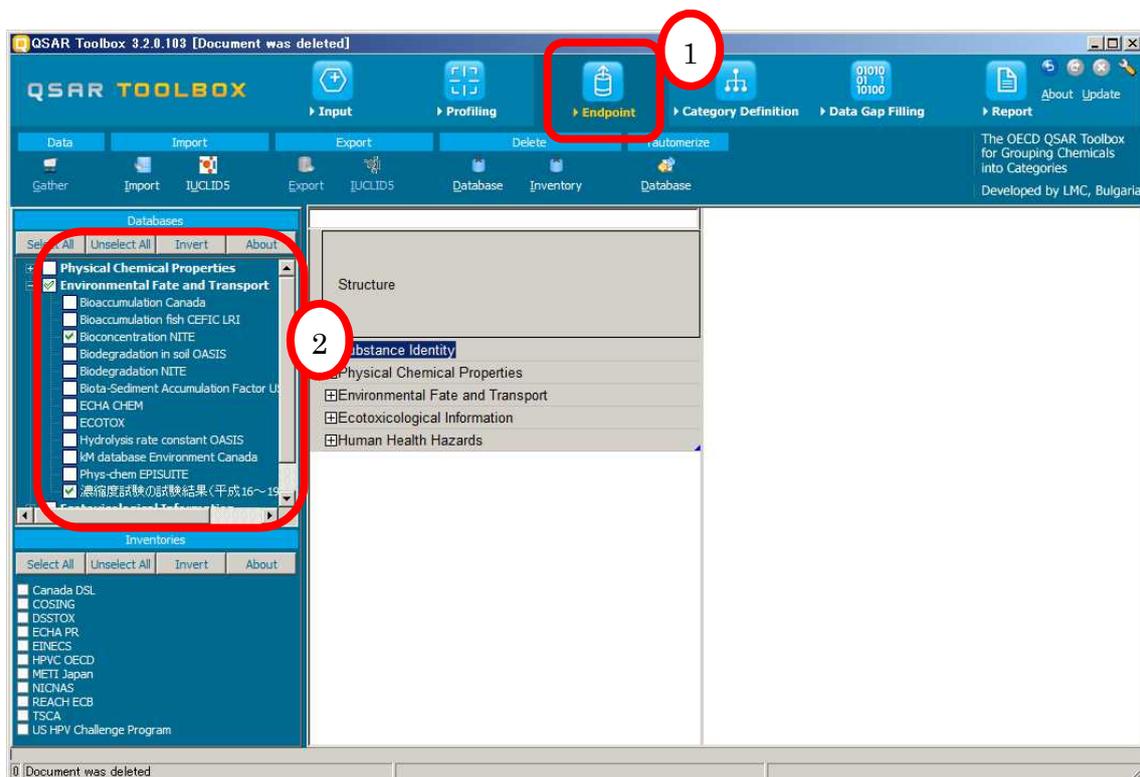
20. “OK”を選択します。

21. データが表示されます。



3 物質検索 — 類似の分子構造を持つ物質を検索

3.1 使用する DB の選択

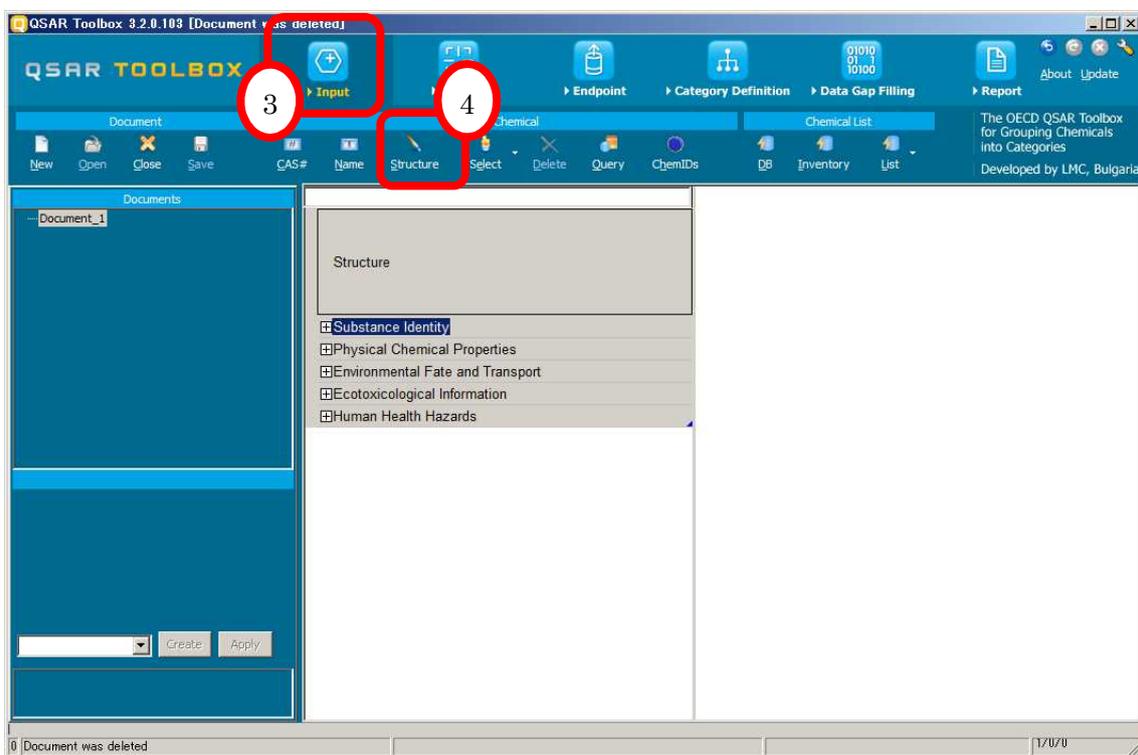


1. “Endpoint”を選択します。
2. “Databases”の中から、使用するデータベースを選択します。

今回は、“Environmental Fate and Transport”の下にある“Bioconcentration NITE”と“濃縮度試験の試験結果（平成 16～19 年度判定分）”（「1 データのインポート」でインポートした DB）を選択します。

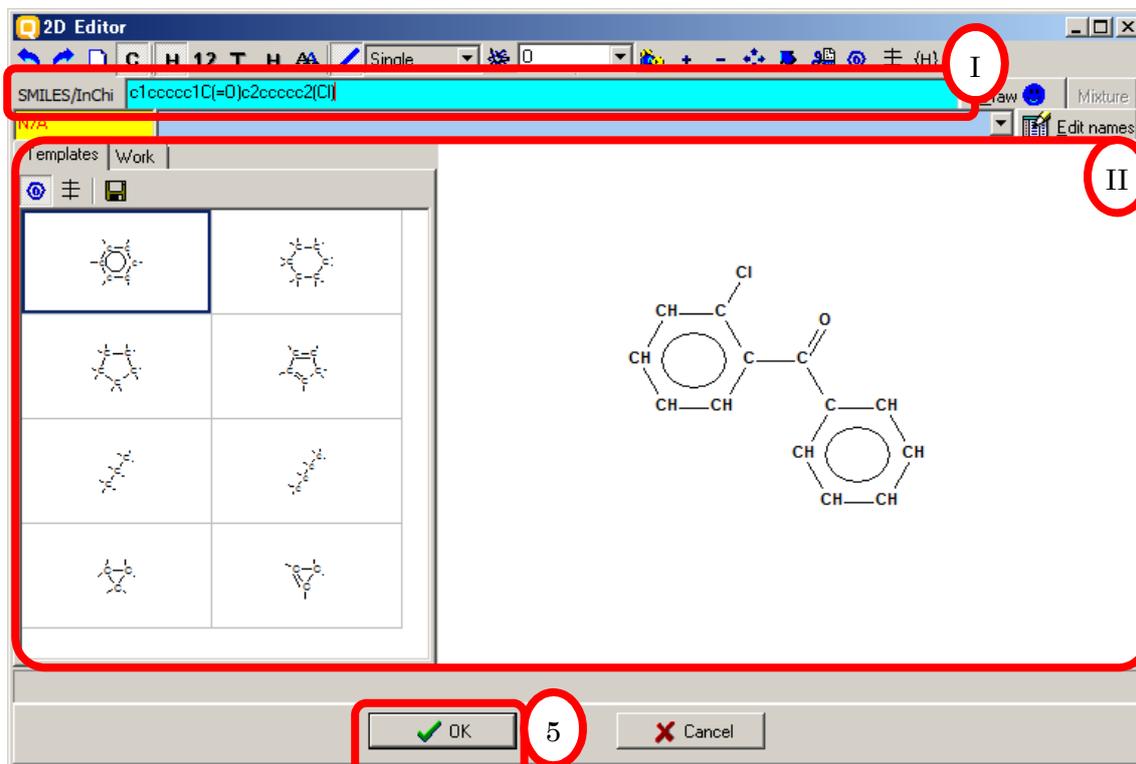
※“Bioconcentration NITE”は、NITE から OECD に提供した化審法既存化学物質の蓄積性データです。

3.2 検索する分子構造の入力



3. “Input”を選択します。
類似物質を検索する物質の構造を入力します。
今回は、構造式エディタから入力します。
4. “Structure”を選択します。

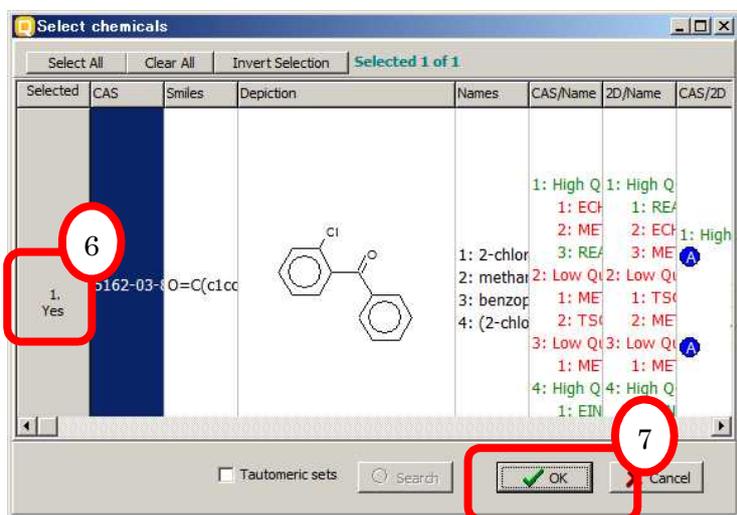
“2D Editor”というウィンドウが表示されます。



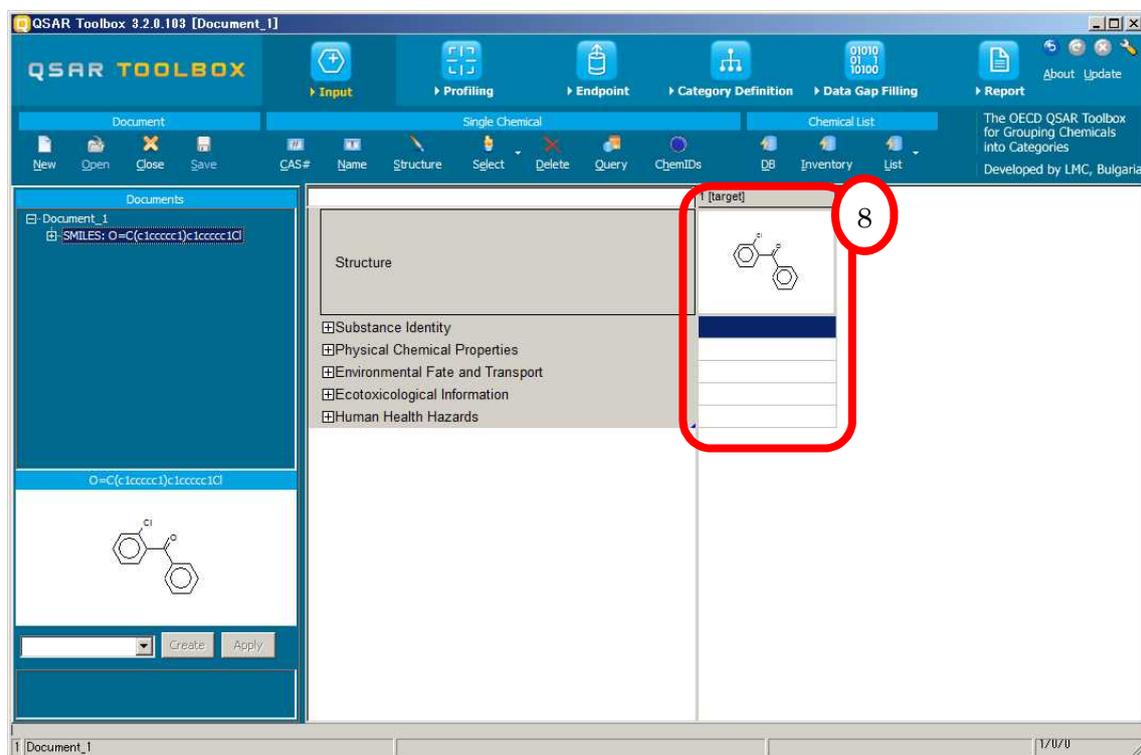
検索する部分構造を次のいずれかの方法で入力します。

- I. 構造式を描くことができます。
- II. SMILES で入力することができます。
5. “OK”を選択します。

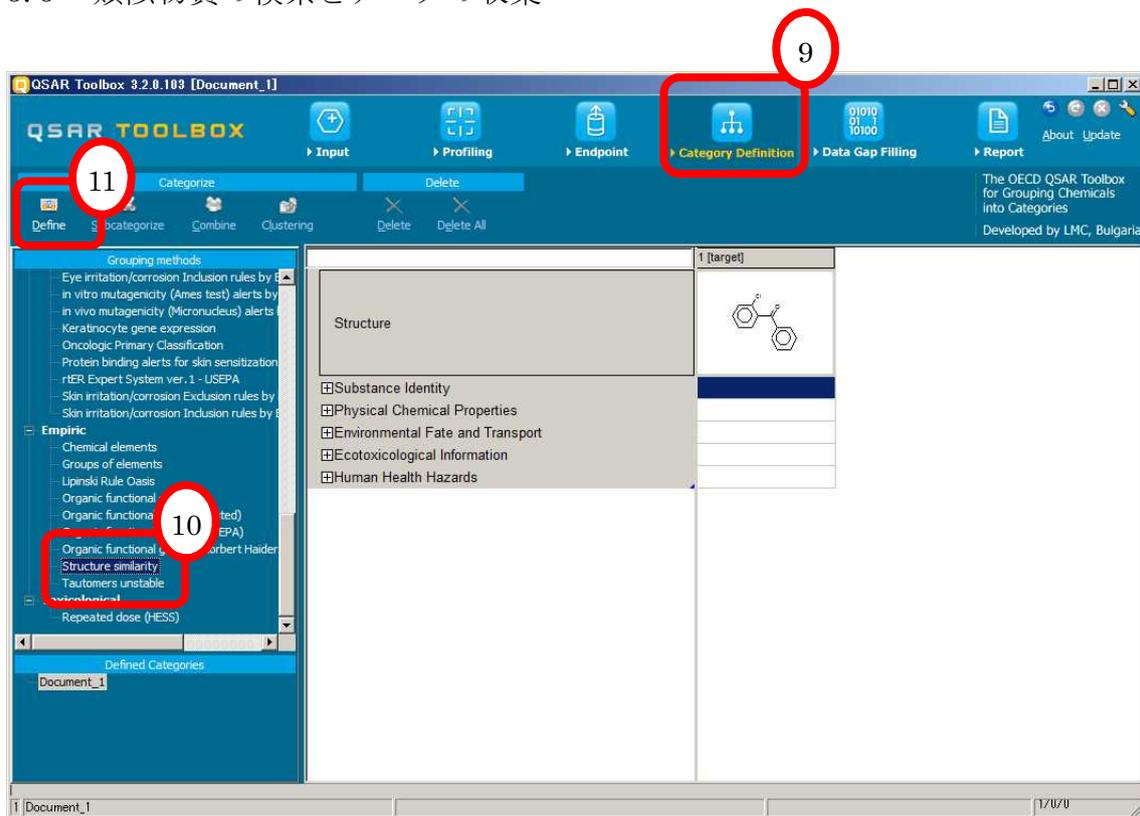
入力した構造が既にデータベースに登録されている場合、“Select chemicals”というウィンドウが表示されます。



6. 複数表示された場合は数字をクリックすることで“Yes”と“No”を切り替え、対象にするデータを選択します。
7. “OK”を選択します。
8. 入力した物質が表示されました。



3.3 類似物質の検索とデータの収集

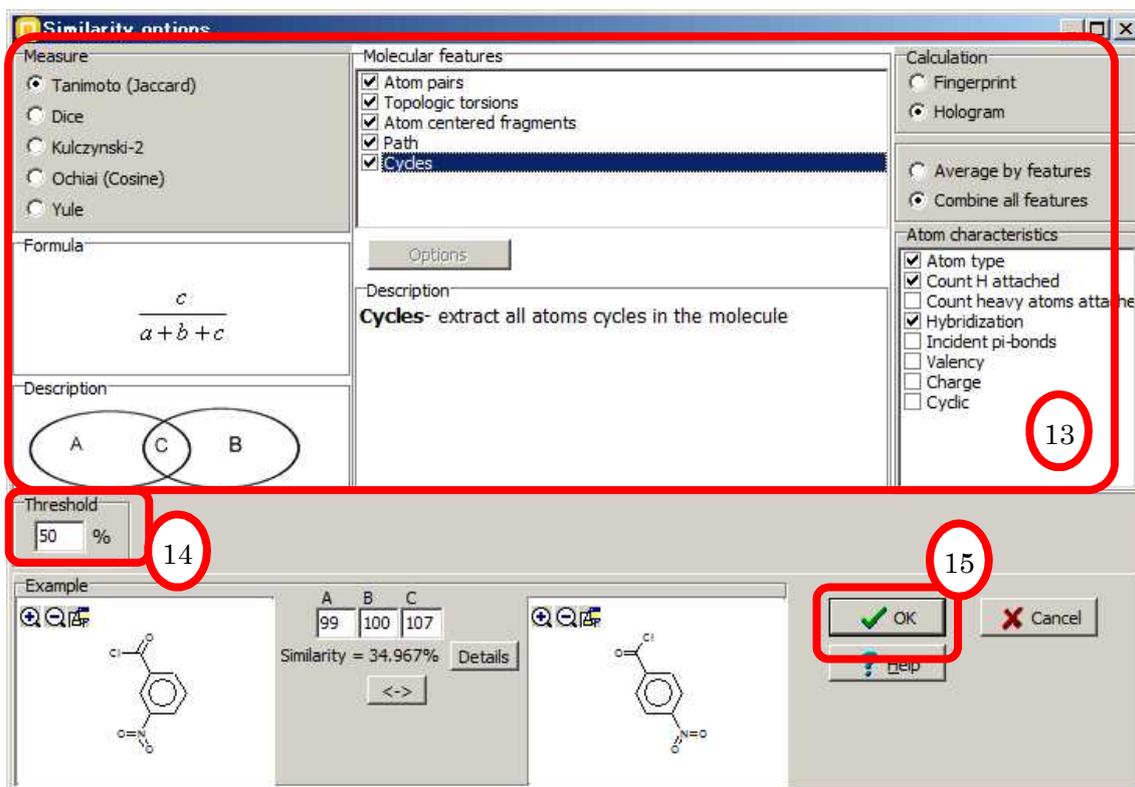


9. “Category Definition”を選択します。
10. “Grouping methods”の中の“Empiric”の下にある“Structure similarity”を選択します。
11. “Define”を選択します。

“Grouping”というポップアップが表示され、
「選択したデータベースとインベントリのみから収集します」
という意味のメッセージが表示されます。



12. “OK”を選択します。



13. 検索条件を入力します。

今回は"Measure"は"Tanimoto(Jaccard)"を、"Molecular features"は"Atom pairs"、
"Topologic torsions"、"Atom centered fragments"、"Path"、"Cycles"を選択します。

※ これらの条件の詳細はHelpを御覧ください。

14. 類似度のしきい値を入力します。

今回は50%としました。

15. "OK"を選択します。

検索されます。少々お待ちください。

"Define category name"というポップアップが表示されます。



16. カテゴリー名を入力します。

今回は、表示されたカテゴリー名を変更せずに使用しました。

17. "OK"を入力します。

“Data”というポップアップが表示され、
「選択したデータベースからのみデータを引用します」
という意味のメッセージが表示されます。



18. “OK”を選択します。



引用するデータの範囲を選択します。

- I. 今回は、“All endpoints”を選択します。
- II. 今回は“from Tautomers”にチェックを入れます。

19. “OK”を選択します。

“QSAR Toolbox”というポップアップが表示されます。



20. “OK”を選択します。

21. データが表示されました。

The screenshot shows the QSAR Toolbox 3.2.0.103 interface. The main window displays a comparison table of chemical structures across four columns. The first column is labeled '1 (target)'. The second, third, and fourth columns show similar structures. A red circle highlights the number '21' in the bottom right corner of the table area. The interface includes a top menu bar with options like 'Input', 'Profiling', 'Endpoint', 'Category Definition', 'Data Gap Filling', and 'Report'. A left sidebar lists various grouping methods such as 'Empiric' and 'Toxicological'. The bottom status bar shows 'Similarity: Threshold=50%, Tanimoto (Jaccard) (Atom pairs; Topologic torsion)' and '17/0/0'.

	1 (target)	2	3	4
Structure				
Substance Identity				
Physical Chemical Properties				
Environmental Fate and Transport	(3/5)	M: 0.857 log(L/kg w...	M: 1.89 log(L/kg wet)	M: 0.964 log(L/kg w...
Ecotoxicological Information				
Human Health Hazards				

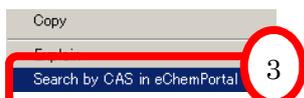
4 詳細データの確認

お使いのパソコンがインターネットに接続されている場合、OECD の eChemPortal のページを表示させ、詳細データを確認することができます。

The screenshot shows the QSAR Toolbox 3.2.0.103 interface. The main window displays a table of chemical data with columns for target IDs (6, 7, 8, 9) and chemical structures. The 'Substance Identity' section is expanded, showing details for a selected chemical. A red circle labeled '1' highlights the '+' icon next to 'Substance Identity'. Another red circle labeled '2' highlights the CAS number '119-61-9' in the table. The table data is as follows:

6 [target]	7 [target]	8 [target]	9 [target]
61968-28-3	119-61-9	443-1	606-
NA	Chemical Name: 6	Chemical Name: 204...	Chemical Name: Eine
c.i. disperse blue 87-1	methanone, diphenyl- disperse blue-143	9,10-anthracenedio... 1-hydroxyanthraqui... anthraquinone, 1-hy... diphenyl methanone 1-hydroxyanthracen... 1-hydroxy-9,10-ant...	benz... 2-be... met... benz... met...
CCCCOCCN1C(=O...	O=C(c1ccccc1)c1c...	Oc1cccc2c1C(=O)...	COO
(24/47) M: 0.643 log(L/kg w...	M: 0.964 log(L/kg w...	M: 2.5 log(L/kg wet...	M: C

1. "Substance Identity"の左の"+"を選択し、詳細項目を表示させます。
2. 詳細を見たい物質のCAS番号の上で右クリックします。



3. "Search by CAS in eChemPortal"を選択します。

ブラウザが開き、eChemPortal のページが表示されます。



[Print](#)
English ▾

The Global Portal to Information on Chemical Substances


eChemPortal

eChemPortal

- > Home
- > Substance Search
- > Property Search
- > What's new?
- > General Information
- > Participating Databases
- > Roles & Responsibilities
- > Extension of the Portal
- > Linking to eChemPortal
- > Schedules of Assessments
- > Structure Search
- > GHS Classifications
- > Other useful information
- > FAQ
- > Help
- > Contact us
- > Disclaimer

Substance Search

Substance Search > Search Result Step 1

Search history & Ways to proceed

- You searched for
 Number: 119-61-9
 Participants: ACToR, AGRITOX, APVMA-CR, CCR, CESAR, Combined Exposures, ECHA CHEM, EnviChem, EPA HBBP, EPA OPPALB, ESIS, GDL, GHS-J, G5BL, HPVIS, HSDB, HSNO CCID, INCHEM, INERIS-PSC, J-CHECK, JECDB, NICNAS Other, NICNAS PEC, OECD HPV, OECD SIDS IUCLID, SIDS UNEP, SPIN, UK CCRMP Outputs, US EPA IRIS, US EPA SRS
- Click any of the links below to see details
- Save as [Bookmark](#)

Search information

For more details on the substance search mechanism, please go to help in the left menu bar.

Overall query results

Click the following link to see details for all query results.

- [11 Line\(s\) with 25 Hit\(s\)](#) found as overall query results (including indirect query results)

Query results, level 1

You search criteria covered the substance(s) below or the same substance(s) identified by another participant. Click on the column headers to sort the results in the table.

	I	II	Name	III
9	119-61-9 (CAS Number)		Benzophenone (Unknown)	
3	119-61-9 (CAS Number)		Methanone, diphenyl- (Unknown)	
3	119-61-9 (CAS Number)		benzophenone (IUPAC Name)	
2	119-61-9 (CAS Number)		Benzophenon (Unknown)	
2	119-61-9 (CAS Number)		diphenyl methanone (IUPAC Name)	
1	119-61-9 (CAS Number)		Benzophenone, >26% in a non hazardous diluent (Unknown)	
1	119-61-9 (CAS Number)		Diphenylmethanon (Unknown)	
1	119-61-9 (CAS Number)		BENZOPHENONE (Unknown)	
1	119-61-9 (CAS Number)		Benzophenone, >3 - 26% in a non hazardous diluent (Unknown)	
1	119-61-9 (CAS Number)		benzophenone (IUPAC Name)	

10 Line(s) with 24 Hit(s).

Indirect query results, level 2

The table below contains the results of a subsequent search on numbers, names or synonyms based on the query results. Click on the column headers to sort the results in the table.

Hit(s)	Number	Name
1		Benzophenone (Unknown)

1 Line(s) with 1 Hit(s).

© OECD. All rights reserved. Terms & Conditions | Privacy Policy
Home

I. eChemPortal に登録されているデータのうち、CAS 番号、物質名称が一致する 9 物質数が表示されます。

いずれかの行の数字を選択すると、選択した行の CAS 番号、物質名称で登録されている物質のリストのページが表示されます。

II. eChemPortal に登録されている CAS 番号が表示されます。

選択すると、選択した CAS 番号で登録されている物質のリストのページが表示されます。

III. eChemPortal に登録されている名称が表示されます。

選択すると、選択した名称で登録されている物質のリストのページが表示されます。

今回は CAS 番号"119-61-9"を選択します。

登録されている物質のリストのページが表示されます。

The screenshot shows the OECD eChemPortal interface. The main content area is titled "Substance Search" and displays search history for the number 119-61-9. Below the history, there is a table of search results. The table has columns for Check, Number, Name, Remark, Level, Result, and Source. The results are for Benzophenone (Unknown) with CAS number 119-61-9. The "Result" column shows a blue icon with a white square, and the "Source" column shows "J-CHECK". A red box highlights the "Result" column for the "J-CHECK" source, with the number "4" written inside the box.

Check	Number	Name	Remark	Level	Result	Source
	119-61-9 (CAS Number)	Benzophenone (Unknown)				OECD HPV
	119-61-9 (CAS Number)	Benzophenone (Unknown)				GSBL
	119-61-9 (CAS Number)	Benzophenone (Unknown)				GSBL
	119-61-9 (CAS Number)	Benzophenone (Unknown)				GSBL
<input type="checkbox"/>	119-61-9 (CAS Number)	Benzophenone (Unknown)				J-CHECK
<input type="checkbox"/>	119-61-9 (CAS Number)	Benzophenone (Unknown)				J-CHECK

4. "J-CHECK"の行にある"Result"のマークを選択します。

J-CHECK のページが表示されました。

The screenshot shows the J-CHECK website interface in Japanese. The header includes the logo for nite (National Institute of Technology and Evaluation) and the text 'J-CHECK 化審法データベース Japan CHEmicals Collaborative Knowledge database'. A navigation menu on the left lists various categories like 'Information', 'Search', and 'Act on the Evaluation of Chemical Substances'. The main content area is titled 'Substance Data' and 'Chemical Substances Information'. It displays a table with columns for 'CAS Registry Number', 'MITI Number', 'Chemical Substance Name', and 'Chemical Structure'. The entry for Benzophenone is shown with its CAS number 119-61-9 and MITI number 4-125. Below this, there is a 'Regulatory Classification' table with columns for 'Regulatory Classification', 'Cabinet Order No./Registration No.', 'Chemical Substance Name', 'date', and 'Remarks'. The 'Screening Info' section is also visible at the bottom. In the top right corner, there is a language selection menu with 'Japanese' selected, and a red circle with the number '5' is overlaid on it.

5. “Japanese”を選択すると、日本語で表示することができます。

日本語のページが表示されます。

nite 独立行政法人 製品評価技術基盤機構 | English

化審法データベース Japan CHEMicals Collaborative Knowledge database

用語

○ J-CHECKIに関する情報
 ▶ J-CHECKIについて
 更新履歴

○ 検索
 ▶ 化学物質検索

○ 化審法対象物質リスト
 ▶ 第1種特定化学物質
 ▶ 第2種特定化学物質
 ▶ 監視化学物質
 ▶ 優先評価化学物質
 ▶ 一般化学物質

○ 新規公示化学物質
 ▶ 新規公示化学物質

○ 既存化学物質
 ▶ 既存化学物質

○ 旧化審法対象物質リスト

○ 改正化審法・リスク評価関連情報
 ▶ 届出不要物質
 ▶ 届が保有する化学物質の有害性情報等
 ▶ 優先評価化学物質のリスク評価(一次)評価1の結果及び対応について
 リスク評価(一次)評価II対象物質の暴露情報(審査中の情報)(2013.07.19)の暴露評価等も、審査中の情報であるため、今後数値の変更等があります。)

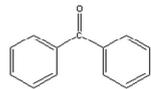
○ 化審法関連情報
 ▶ 化審法の施行状況
 ▶ 政令指定製品等

○ Japanチャレンジプログラム
 ▶ 対象物質一覧
 ▶ Japanチャレンジプログラムについて

○ 関連リンク

詳細画面

化学物質情報

CAS番号	MITI番号	化学物質名称	化学構造式
119-61-9	4-125	ベンゾフェノン	

化審法に関する情報

法規制分類	政令番号もしくは通し番号	化学物質名称	日付	備考
既存化学物質	-	ベンゾフェノン		

スクリーニング評価情報

公表年度	人健康影響			生態影響			専門家による詳細評価
	暴露クラス	有害性クラス	優先度	暴露クラス	有害性クラス	優先度	
2013	外	-	-	外	-	-	

備考
 評価はCAS番号単位で実施されている。

製造・輸入数量実績

年度	MITI番号	通し番号	化学物質名称	分類	製造・輸入数量(t)	備考
2012	4-125		ベンゾフェノン	一般化学物質	-	他の官報公示整理番号に統合したものは「製造輸入数量」欄に「-」を表示している。(3-1258へ集計)

公表情報

出典	公表年月日	公表名称	公表内容	判定結果	備考
通産省公報	1980/12/25	ベンゾフェノン	濃縮性がない又は低いと判断される物質		

詳細情報

試験報告書
[魚類\(ヒメダカ\)急性毒性試験](#)
[ミジンコ急性毒性試験](#)
[ミジンコ慢性毒性試験](#)
[濃縮度試験](#) 6
[慢性毒性試験](#)
[環境生態毒性試験](#)

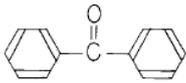
6. “詳細情報”の中から“濃縮度試験”を選択します。

濃縮度試験報告書の PDF が表示されました。

濃 縮 度 試 験 報 告 書

1. 試料名 (試料No E-497)
ベンゾフェノン

構造式



同定 MSスペクトル (図-1 参照)

性状

外観	柱状晶	融点(℃)	49
純度(%)	99	沸点(℃)	306
比重	1.0976		

溶解性 別水-45 ppm
別有機溶媒-アセトン, アセトニトリル, クロロホルム, n-ヘキサン 10⁴ ppm

(注) 上記の数値まで溶解性を確認
(XXXXXXXXXX 試験使用)

2. 試験期間 昭和55年1月28日～昭和55年4月30日

3. 試験方法及び条件
積保業第 5号
産 第 615号 (魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験による
49基局第 392号)

3.1 TLm試験

(a) 試験魚
ヒメダカ 平均体重 0.25 g 塩化第二水銀検定合格魚*
*田端健二: 用水と海水, 1.1, 1297～1303 (1972)

(b) 溶解法 (分液剤及び分散法)
分散剤-硬化ヒマシ油 (HCO 40)
溶解法 (分数法)
供試物質 1 g と硬化ヒマシ油 (HCO-40) 5 g をアセトン 50 ml に溶解した後、アセトンを留去する。つきに水を加えて全量を 1 l にし、10² ppm (W/V) の原液を調製した。

(c) 試験温度 25 ± 1 ℃

(d) 試験結果 48時間 TLm 値: 27 ppm (W/V)
(図-3 参照)