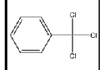
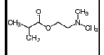
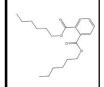
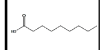
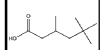
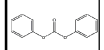
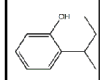
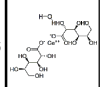
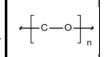
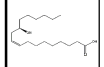
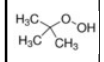
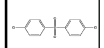
資料1－3 （参考）日本バイオアッセイ研究センター検討結果

日本バイオアッセイ研究センター追記情報（2020/4/30）

基本情報			構造式	分析			性状		現在の試薬入手可否（純度・販売量・価格・在庫等）						試験実施可否	文献情報		
No.	物質名	CAS No.		赤外吸光分析	分析可否／使用機器	分析情報		物性情報等	富士フイルム和光純薬	東京化成	関東化学	ｼｸﾞﾏｱﾙﾄﾞﾘｯﾁ	その他	試薬入手可否		ラットLD50（マウス）	①既存化学物質毒性データベース ②HSDB	その他情報
5077	ベンジリジン＝トリクロリド	98-07-7		CCl4 Liquid film	○/GC	https://www.env.go.jp/chemi/prtr/archive/bunseki/list05.html	無色～ほとんど無色透明液体	融点: -5℃ 沸点: 221℃ 水: 不溶（分解）	純度:＞97% 25 mL 1700円 12本 500 mL 4000円 5本	純度:＞99% 25 g 1600円 10本以上 500 g 2800円 問い合わせ	純度:＞99% 500 g 10000円 問い合わせ	純度:98% 500 g 10800円 問い合わせ		○	○ （※その他情報）	R:1300 mg/kg M:702 mg/kg	②あり	毒物 IARC 2A ACGIH A2 日本産業衛生学会第1群 雌ICRマウス、0.0315～2 mL/0.1 mL（0.0435～2.76 mg/0.1 mL）で週2回、25週間強制経口投与。投与開始から18か月後、前胃、肺、造血組織に
852	メタクリル酸2-(ジメチルアミノ)エチル	2867-47-2		Liquid film	○/GC	https://www.city.sapporo.jp/eiken/annual/no26/documents/99report02.pdf	無色～わずかにうすい黄色,澄明の液体	融点: -30℃ 沸点: 70℃ 水に可溶 （10.6g/100mL, 25℃）	純度:＞99% 25 mL 2050円 13本 500 mL 4900円 20本以上	純度:＞98.5% 100 mL 3100円 7本 500 mL 5800円 問い合わせ	純度:99% 250 g 8300円 問い合わせ 1 kg 18000円 問い合わせ	純度:99% 100 mL 2700円 5本 1 L 8400円 1本		○	○	R:1751 mg/kg	①単回:コーン油溶解:500-2000mg/kg ①反復・生殖:コーン油溶解:40-1000mg/kg ①濃度安定性あり ②あり	劇物 安定剤:0.2%MEHQ含む CERI評価書:実験動物に対して目および皮膚に対する刺激性 発がん性評価はされていない
543	チモール	89-83-8		KBr, CCl4 Nujol	○/GC	https://www.mhlw.go.jp/content/000573973.pdf	白色, 結晶～結晶性粉末	融点: 51℃ 沸点: 232℃ 水に難溶（900mg/L, 20℃）	純度:＞98% 100 g 5000円 20本以上 500 g 9300円 20本以上	純度:＞99% 25 g 1600円 10本以上 500 g 8400円 10本以上	純度:＞98% 100 g 4800円 10本未満 500 g 8500円 10本未満	純度:98.5% 100 g 5730円 6本 500 g 15100円 問い合わせ		○	○	R:980 mg/kg M:640 mg/kg	①単回:1%ﾒﾁﾙｾﾙﾛｰｽ水溶液懸濁:300-2000mg/kg ①反復・生殖:3%ｱﾗﾋﾞｱｺﾞﾑ水溶液懸濁:8-200mg/kg ①濃度安定性あり ②あり	
341	ジヘキサン-1-イル=フタラート	84-75-3		Liquid film	△/GC	バックグラウンドからの夾雑の可能性があり、検討が必要 http://www.frontier-lab.com/techinfo/phthalate/pdf/Phthalate_t	無色～ほとんど無色透明液体	融点: -58℃ 沸点: 333℃ 水に不溶	純度:＞97% 50 g 43200円 問い合わせ 250 g 168000円 問い合わせ	純度:＞98% 5 g 5100円 10本以上 25 g 13100円 3本	純度:＞97% 0.5 g 7500円 10本未満	純度:＞99% 0.25 g 9900円 問い合わせ		△ メーカー在庫少・高価	△ （分析検討必要/試薬在庫少/高価）	R:29600 mg/kg	②あり	
199	ノナン酸	112-05-0		Liquid film CCl4	○/GC	https://www.jstage.jst.go.jp/article/jifcs/24/1/24_25/_pdf/-	無色～ほとんど無色透明液体	融点: 11℃ 沸点: 254℃ 水に不溶（284mg/L, 30℃）	純度:＞90% 25 g 1850円 20本以上	純度:＞98% 100 mL 3200円 10本以上 500 mL 7200円 10本以上	純度:＞90% 25 mL 1700円 10本以上 500 mL 10500円 10本未満	純度:96% 500 mL 6400円 1本 1 L 10100円 問い合わせ		○	○	R:5000 mg/kg	②あり	
339	3,5,5-トリメチルヘキサン酸	3302-10-1		Liquid film	○/GC	https://www.chem-agilent.com/appnote/pdf/low_5991-	無色～ほとんど無色透明液体	融点: -77℃ 沸点: 236℃ 水に難溶（0.7 g/L, 20℃）	純度:＞97% 100 mL 3500円 19本 500 mL 4300円 20本以上	純度:＞97% 25 mL1700円 問い合わせ 500 mL 4700円 10本以上		純度: 1 g 19500円 問い合わせ		○	○	R:1160 mg/kg		
344	炭酸ジフェニル	102-09-0		KBr Nujol	○/HPLC	https://www.jstage.jst.go.jp/article/shokueishi1960/35/5/35	白色粉末～結晶	融点: 80℃ 沸点: 302℃ 水に不溶 （58.4mg/L, 25℃）	純度:99% 250 g 7070円 問い合わせ 1000 g 17670円 問い合わせ	純度:＞99% 25 g 2100円 10本以上 500 g 7800円 10本以上	純度:＞99.4% 25 g 2200円 10本以上 500 g 8000円 10本未満	純度:99% 100 g 4200円 問い合わせ 1000 g 13000円 問い合わせ		○	○	R:1500 mg/kg	②	
345	2-sec-ブチルフェノール	89-72-5		Liquid film CCl4	○/GC	https://www.pref.kumamoto.jp/common/UploadFileOutput.a	白色～うすい黄色粉末～結晶	融点: 14℃ 沸点: 228℃ 水に不溶（1.46 g/L, 20.1℃）	純度:98% 25 g 3900円 2本	純度:＞97% 25 g 1700円 問い合わせ 500 g 8000円 10本以上	純度:＞97% 25 g 950円 10本未満	純度:98% 100 g 2400円 5本		○	○	R:320 mg/kg	①単回:コーン油:250-2000mg/kg ①反復・生殖:コーン油:12-300mg/kg ①濃度安定性あり ②あり	劇物
125	グルコン酸カルシウム一水和物*	66905-23-5		NIST× AIST×	×	カルシウム塩であり、定性・定量分析が困難	白色、結晶性粉末または粒	水にやや溶けやすい	純度:＞99% 1 g 2900円 20本以上 25 g 12300円 7本	－	－	純度:＞98% 500 g 8650円 問い合わせ 1 kg 14700円 問い合わせ 純度不明 1 kg 9460円 問い合わせ	米山薬品工業 純度:98% 500g 4900円 問い合わせ	○ 問い合わせ必要	× （同一性分析・定量分析が困難）	R:静注:950 mg/kg	－	
30	ポリ(オキシメチレン)(別名パラホルムアルデヒド)	30525-89-4		KBr Nujol	×	高分子化合物であり、定量できない	白色粉末～結晶	融点: 121-123℃ 沸点: 昇華 熱水に可溶	純度:94% 100 g 2300円 20本以上 500 g 4500円 20本以上	純度:＞90% 25 g 1700円 10本以上 500 g 2900円 4本	純度:＞91% 250 g 1800円 10本以上 500 g 8000円 10本未満	純度:95% 1 kg 5600円 6本 3 kg 10400円 問い合わせ		○	× （定量分析が困難）	R:800 mg/kg	②ホルムアルデヒド	劇物
198	(R, Z)－12－ヒドロキシオクタデカ－9－エン酸	141-22-0		Liquid film	△/GC	https://www.chem-agilent.com/appnote/pdf/5991-1715JAJP	無色～赤色～緑色透明液体～濁った液体	融点: 5.5℃ 沸点: 245℃ 水に難溶	純度:>80% 25 mL 2000円 20本以上 500 mL 3100円 20本以上	純度:>80% 25 mL 1700円 問い合わせ 500 mL 2800円 問い合わせ	純度:>80% 25 mL 1700円 10本以上	純度:99% 0.1 g 12500円 2本	ナカライテスク 純度:>95% 100g 2200円 海外取り寄せ 500g 6800円 海外取り寄せ	○ 確認必要（海外取り寄せ）国内メーカーは純度低い	△ （分析検討を必要とする）		②あり	
340	1,8-オクタン-ジ-カルボン酸[別名：セバシン酸]	111-20-6		KBr Nujol	○/HPLC	https://www.gls.co.jp/technique/app/detail.php?data_number=LA110	白色粉末～結晶	融点: 134℃ 沸点: 295℃ 水に難溶（0.1%, 20℃）	純度:＞97% 25 g 2950円 20本以上 500 g 4800円 20本以上	純度:＞98%上 25 g 1600円 問い合わせ 500 g 4300円 問い合わせ	純度:＞98% 25 g 2200円 10本未満 500 g 4600円 20本以上	純度:99% 250 g 3300円 問い合わせ 1 kg 8100円 問い合わせ		○	○	R:14375 mg/kg		
820	酸化クロム（Ⅵ）	1333-82-0		Nujol	△/ICP-MS	定量的に要検討	暗赤紫色結晶～結晶性粉末	融点: 196℃ 沸点: 分解（250℃） 水に難溶（62.6%, 20℃）	純度:＞98% 100 g 5200円 20本以上 500 g 8300円 20本以上	－	純度:＞98% 100 g 3700円 10本以上 500 g 8500円 20本以上	純度:99.9% 100 g 8400円 問い合わせ 1 kg 12000円 問い合わせ	ナカライ 純度:99.5% 1 kg 8800円 海外取り寄せ 2.5 kg 16300円 海外取り寄せ	○	△ （※その他情報）	R:52-113 mg/kg	②あり	劇物 IARC 1 ACGIH A1 日本産業衛生学会第1群
396	tert－ブチル＝ヒドロペルオキシド	75-91-2		Liquid film	△/LC-MS	https://www.jsbba.or.jp/wp-content/uploads/file	無色透明液体（70%水溶液）	融点: -3℃ 沸点: 89℃ 水に可溶	純度:70%inH2O 100 mL 5700円 20本以上 500 mL 14500円 11本	純度: 70%inH2O 100 g 3800円 問い合わせ	純度: 70%inH2O 250 g 6100円 問い合わせ 500 g 6300円 問い合わせ	純度: 70%inH2O 100 mL 5200円 2本 1 L 10400円 問い合わせ		○ （70%水溶液のみ）	△ （分析法の確立必要）	R:370 mg/kg	②あり	70%水溶液のみ販売
643	ピペラジン	110-85-0		KBr, Nujol Liquid film	△/LC-MS	https://www.mhlw.go.jp/file/05-Shingikai-11121000-Iyakushokuhinkyoku-	白色粉末～結晶	融点: 112℃ 沸点: 146℃ 水に可溶 （15g/100mL, 20℃）	純度:99% 100 g 5070円 問い合わせ 500 g 10940円 問い合わせ	純度:＞98% 25 g 2100円 10本以上 500 g 6200円 10本以上	純度:99% 100 g 3600円 問い合わせ 500 g 7500円 問い合わせ	純度:99% 500 g 6200円 1本 1 kg 10800円 問い合わせ		○	△ （分析法の確立必要）	R:1900 mg/kg	②あり	
854	2－エチルペルオキシヘキサン酸 tert－ブチル	3006-82-4		NIST○ AIST×	△	GCで要検討	無色または淡黄色透明液体	無色液体	－	－	－	－	日本油脂 純度:97%以上 10 kg 問い合わせ		× （試薬入手不可/分析検討必要）			
534	4,4'-ジクロロジフェニル スルホン	80-07-9		KBr Nujol	○/HPLC	https://www.cerij.or.jp/research_assistant_project/tox_omics/27_AR.pdf	白色～ほとんど白色粉末～結晶	融点: 148℃ 沸点: 250℃ 水に殆ど溶けない	純度:＞97% 25 g 3700円 14本 500 g 24000円 1本	純度:＞98% 100 g 4100円 問い合わせ 500 g 13100円 問い合わせ	純度:99% 250 g 6500円 問い合わせ 1 kg 16800円 問い合わせ	純度:98% 100 g 4400円 問い合わせ 500 g 14300円 問い合わせ		○	× （NTPでラット・マウスの発がん性試験報告あり）	R:>3000 mg/kg	②あり	NTP報告書（TR-501：混餌）あり。ラット（雄：10,30,100ppm、雌：30,100,300ppm）・マウス（雌雄：30,100,300ppm）とも陰性ほ報告。
178	トリエチレンジアミン	280-57-9		KBr Nujol	△/LC-MS	LC-MSにおいてイオン化するが、クロマト形成にテーリングの可能性	白色～うすい黄色粉末～結晶	融点: 155℃ 沸点: 174℃ 水に可溶(45g/100g, 25℃)	純度:＞95% 25 g 2100円 10本以上 500 g 12500円 20本以上	純度:＞98% 100 g 6600円 問い合わせ 500 g 14200円 7本	純度:95% 100 g 5750円 20本以上 500 g 12400円 20本以上	純度:＞99% 100 g 5800円 2本 500 g 12600円 問い合わせ		○	△ （分析法の確立必要）	R:1700 mg/kg	②あり	
41	一酸化窒素	10102-43-9		NIST○ AIST×					－	－	－	－		×	×			「二酸化窒素」で遺伝子改変マウスを用いた中期発がん性試験を実施し、報告書提出済み（2019年度） 環境中では、は「二酸化窒素」（2NO＋O2→2NO2）で存在。 https://www.mhlw.go.jp/file/05-Shingikai-11201000-
867	二酸化チオ尿素	4189-44-0		NIST× AIST×	△	ジアミノ化合物で、吸収がなく分析ができないと考えられる	白色～わずかにうすい黄色,結晶～粉末	融点: － 沸点: － 水にやや溶けやすい	純度:＞97% 500 g 7700円 20本以上	－	－	－		○	△ （分析法の確立必要）		①単回:0.5%CMC水溶液懸濁:1024-2000mg/kg ①反復・生殖:0.5%CNC水溶液溶解/懸濁:4-100mg/kg ①濃度安定性あり ②あり	
5079	ヘプタオキシドニクロム酸二カリウム	7778-50-9		KBr Nujol	△	定量的に要検討	黄みの赤色～赤みの黄色,結晶～結晶性粉末	融点: 398℃ 沸点: 500℃(分解) 水にやや溶けやすい（10.7%, 20℃）	純度:＞99.5% 100 g 2500円 20本以上 500 g 5000円 20本以上	－	純度:＞99.5% 100 g 2500円 20本以上 500 g 5000円 20本以上	純度:＞99% 100 g 12500円 1本 500 g 17900円 問い合わせ		○	△ （※その他情報）	R:17 mg/kg	②あり	劇物 IARC 1 ACGIH A1 日本産業衛生学会第1群