

(2) 変化物の定性分析

LC-MS 試料について、変化物の定性分析を行った。また、被験物質溶液について同様に分析を行った。

(a) 分析条件

| | |
|--------------------|--|
| 機 器 | 液体クロマトグラフ質量分析計 |
| 液体クロマトグラフ | Waters 製 Alliance2695 |
| 質量分析計 | Waters 製 ZQ2000 |
| 多波長検出器 | Waters 製 2996PDA |
| ポンプ (ポストカラム) | 島津製作所製 LC-20AD |
| <u>液体クロマトグラフ条件</u> | |
| カ ラ ム | L-column ODS (15 cm×2.1 mm I.D., 化学物質評価研究機構製) |
| カ ラ ム 温 度 | 40℃ |
| 溶 離 液 | A: テトラヒドロフラン B: 超純水 |
| | グラジエント条件 |
| | 時間 (min) A (%) B (%) |
| | 0.0 40 60 |
| | 1.0 40 60 |
| | 11.0 100 0 |
| | 16.0 100 0 |
| 流 量 | 0.2 mL/min |
| 注 入 量 | 10 μL |
| 測 定 波 長 | 265~300 nm |
| ポストカラム | |
| 溶 液 | 20 mmol/L 酢酸アンモニウム溶液/メタノール (1/1 v/v) |
| 流 量 | 0.1 mL/min |
| <u>質量分析計条件</u> | |
| イオン化法 | エレクトロスプレーイオン化法 (ESI) |
| 検出イオン | 負イオン |
| 検出法 | スキャン |
| 走査質量範囲 (m/z) | 150~1000 |
| イオン源温度 | 120℃ |
| 脱溶媒システム温度 | 400℃ |
| コーン電圧 | 40 V |

(b) 被験物質溶液の調製

1.5.2(1)(b)で調製した標準溶液を 300 mg/L の被験物質溶液とした。

1.5.3 回収試験及びブランク試験

前述した前処理における試験液からの被験物質の回収率を求めるため、1.2 に準じて調製した (水+被験物質) 系及び (汚泥+被験物質) 系の試験液について 1.5.1 及び 1.5.2(1) に従い、回収試験を行った。また、1.2 に準じて調製した汚泥ブランク系の試験液について回収試験と同じ操作によりブランク試験を行った。回収試験については各 2 点、ブランク試験については 1 点測定した。この結果、ブランク試験においてクロマトグラム上、被験物質ピーク位置にはピークは認められなかった。分析操作における各 2 点の回収率及び平均回収率は下記のとおりであり、平均回収率を試験液中の被験物質濃度を求める場合の補正值とした。

| | | | |
|------------------|--------------|----|-------|
| (水 + 被験物質) 系回収率 | 96.7%, 98.1% | 平均 | 97.4% |
| (汚泥 + 被験物質) 系回収率 | 94.9%, 94.7% | 平均 | 94.8% |

1.6 分解度の算出法

分解度は下記の式に基づき算出し、小数点以下 1 ケタ目を丸めて整数位で表示した。

なお、(水+被験物質) 系における被験物質残留率が 90% 未満 (87%) となったため、被験物質分解度 (被験物質の直接分析による分解度) は算出せず、被験物質の添加量に対する減少率を求めた。

(1) BOD 分解度

$$\text{分解度 (\%)} = \frac{\text{BOD} - \text{B}}{\text{TOD}} \times 100$$

BOD : (汚泥+被験物質) 系の生物化学的酸素消費量 (測定値: mg)

B : 汚泥ブランク系の生物化学的酸素消費量 (測定値: mg)

TOD : 被験物質が完全に酸化された場合に必要とされる理論的酸素消費量
(計算値: mg)

(2) 被験物質減少率

$$\text{減少率 (\%)} = \frac{\text{Sw} - \text{Ss}}{\text{Sw}} \times 100$$

Ss : (汚泥+被験物質) 系における被験物質の残留量 (測定値: mg)

Sw : 被験物質の添加量 (mg)

1.7 数値の取扱い

数値の丸め方は、JIS Z 8401 : 1999 規則 B に従った。

2. 試験条件の確認

試験の有効性の基準値と本試験における値を下表に示す。本試験における値はいずれも基準値を満たしたことから、本試験は有効であった。

| | | 本試験における値 | 基準値 |
|--------------------|---------|----------|--------------------------|
| 分解度(減少率)の最大値と最小値の差 | BOD 分解度 | 2% | 20%未満 |
| | 被験物質減少率 | 2% | |
| アニリンのBOD分解度 | 7日後 | 65% | 40%以上 |
| | 14日後 | 70% | 65%以上 |
| 汚泥ブランク系のBOD値 | 28日後 | 6.9 mg | 18 mg 未満 (60 mg/L 未満) |

3. 試験成績の信頼性に影響を及ぼしたと思われる環境要因

当該要因はなかった。

4. 試験結果

4.1 試験液の状況

試験液の状況は下記のとおりであった。

| | 試験液 | 状況 | pH |
|-------|------------|---|-------------------------------|
| 培養開始時 | (水+被験物質)系 | 被験物質は溶解しなかった。 試験液は無色であった。 | - |
| | (汚泥+被験物質)系 | 被験物質は溶解しなかった。 試験液は無色であった。 | - |
| 培養終了時 | (水+被験物質)系 | 不溶物が認められた。 試験液は無色であった。 炭酸ガス吸収剤に褐色の着色が認められた。 | [1] 8.7 |
| | (汚泥+被験物質)系 | 汚泥以外の不溶物が認められた。 汚泥の増殖は認められなかった。 試験液は無色であった。 炭酸ガス吸収剤に褐色の着色が認められた。 | [2] 7.3 [3] 7.3 [4] 7.3 |

4.2 試験液の分析結果

28日後の分析結果は下記のとおりであった。

| | | (水+被験物質)系 | (汚泥+被験物質)系 | | | | 理論量 |
|--------------------|----|-----------|------------|------|------|------|-----|
| | | [1] | [2] | [3] | [4] | | |
| BOD ^{*3} | mg | 1.8 | -2.0 | -3.4 | -3.7 | 88.5 | |
| 被験物質残留量及び残留率(HPLC) | mg | 26.2 | 26.3 | 26.9 | 26.6 | 30.0 | |
| | % | 87 | 88 | 90 | 89 | - | |
| 変化物の検出・不検出(LC-MS) | - | 検出(1成分) | | | | - | |

*3 (汚泥+被験物質)系は、汚泥ブランク系の値を差し引いて表示した。

4.3 分解度

28日後の分解度は下記のとおりであった。

なお、(水+被験物質)系における被験物質残留率が90%未満(87%)となったため、被験物質分解度(被験物質の直接分析による分解度)は算出せず、被験物質の添加量に対する減少率を求めた。

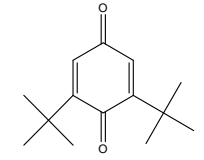
| | | (汚泥+被験物質)系 | | | |
|---------------|---|------------|-----|-----|-----------|
| | | [2] | [3] | [4] | 平均 |
| BOD分解度 | % | -2 | -4 | -4 | 0 (-3) *1 |
| 被験物質減少率(HPLC) | % | 12 | 10 | 11 | 11 |

*1 分解度の平均値が負の値に算出されたため、平均値を0としカッコ内にその計算値を示した。

4.4 変化物の定性分析結果

LC-MS [フォトダイオードアレイ(PDA)同時検出]による定性分析の結果、(水+被験物質)系及び(汚泥+被験物質)系におけるPDAクロマトグラム($\lambda=265\sim 300\text{ nm}$)上の保持時間11.2分付近に変化物と思われるピークが1本検出された。そこで、このピークが溶出していると考えられたトータルイオンカレント(TIC)クロマトグラム上の領域Aのマススペクトルの解析を行った結果、 $m/z=237$ が有意なイオンとして検出され、被験物質が酸化された2,6-ジ-tert-ブチル-p-ベンゾキノンと推定された(下表参照)。TICクロマトグラム及びPDAクロマトグラム上にはその他の変化物は認められなかった。

LC-MS分析で検出された変化物

| 変化物 | 保持時間 ^{*4} (分) | 検出イオン及び帰属 | 推定分子量 | 推定構造式 |
|-----|------------------------|-------------------------------|-------|---|
| A | 11.2 | 237 [M+H ₂ O-H] | 220 |  |

*4 LC-MS分析におけるPDAクロマトグラム上の保持時間

4.5 考 察

(1) BOD 分解度について

BOD 分解度は平均 0% (-3%)^{*)}であったことから、被験物質の微生物による分解性は認められなかった。

(2) 被験物質残留率について

HPLC による被験物質の定量分析結果、(水+被験物質)系及び(汚泥+被験物質)系における被験物質残留率は 87~90%であり、約 10%の収支不足が生じた。なお、(水+被験物質)系においては HPLC クロマトグラム上に変化物(変化物 A とする)と考えられるピークが 1 本検出されたが、(汚泥+被験物質)系では検出されなかった。したがって、被験物質は非生物的作用により変化を生じたと考えられる。

(3) LC-MS による変化物の定性分析結果について

(2)より変化物の生成が考えられたため、LC-MS (PDA 同時検出)による変化物の定性分析を行った。その結果、(水+被験物質)系及び(汚泥+被験物質)系ともに、PDA クロマトグラム上に変化物 A と考えられるピークが 1 本検出された。PDA 検出器の測定波長が被験物質分析時の測定波長を網羅していること及び PDA クロマトグラム上には被験物質ピーク、ブランクピーク及び変化物 A と考えられるピークのみが検出され、その他に変化物と考えられるピークは検出されなかったことから、保持時間 11.2 分付近のピークは被験物質分析における(水+被験物質)系で検出された変化物 A と考えられるピークと同一のものであると判断された。HPLC 分析では変化物 A は(水+被験物質)系のみ検出され、(汚泥+被験物質)系では検出されなかったが、LC-MS 分析では(水+被験物質)系のみならず、(汚泥+被験物質)系からも変化物 A が検出された原因として、PDA 検出器の波長範囲は 265~300 nm と幅を有しており、被験物質の定量分析条件よりも変化物 A の検出に適した条件であったためと考えられた。変化物 A が溶出していると考えられた TIC クロマトグラム上の領域 A のマススペクトル解析を行った結果、 $m/z = 237$ のイオンが検出され、2,6-ジ-tert-ブチル-p-ベンゾキノンと推定された(4.4 参照)。

(4) 炭酸ガス吸収剤(ソーダライム)の着色成分について

(3)より試験液中には 2,6-ジ-tert-ブチル-p-ベンゾキノン以外の変化物は認められなかったが、試験容器内に装着している炭酸ガス吸収剤に着色が認められており、その他の変化物の生成が疑われたため、炭酸ガス吸収剤中の被験物質の定量分析及び変化物の定性分析を実施した(4.1 及び 5.1 参照)。その結果、炭酸ガス吸収剤から被験物質は検出されなかったが、変化物 B (構造式不明)が検出された。したがって、培養期間中に一部の被験物質は炭酸ガス吸収剤に移行し、接触して変化したと考えられる。なお、炭酸ガス吸収剤から検出された変化物 B は微生物と接触していないため、微生物による分解については不明である。

(5) 炭酸ガス吸収剤の影響について

(2)、(3)及び(4)より、本試験条件下において、被験物質が変化したことが示唆された。しかし、予備検討の結果より、試験容器内に炭酸ガス吸収剤を装着しない試験液において、被験物質はほぼ理論量残留し、変化物の生成は認められなかった(5.2 参照)。したがって、本試験条件下における被験物質の変化は炭酸ガス吸収剤の影響によるものであり、炭酸ガス吸収剤が存在しなければ変化しないと考えられる。

(6) ま と め

(2)及び(3)より、本試験条件下において、被験物質の一部は変化して 2,6-ジ-tert-ブチル-p-ベンゾキノンを生成した。また、(4)より、被験物質の一部は試験液から炭酸ガス吸収剤であるソーダライムに移行して構造式不明の変化物 B を生じた。(5)より、(2)、(3)及び(4)で認められた被験物質の変化は炭酸ガス吸収剤の影響によるものと判断された。(1)より、残りの被験物質と生成した 2,6-ジ-tert-ブチル-p-ベンゾキノンは微生物により分解されなかったと考えられる。

4.6 結 論

本試験条件下において、被験物質の一部は炭酸ガス吸収剤の影響により変化して 2,6-ジ-tert-ブチル-p-ベンゾキノンを生成した。また、被験物質の一部は試験液から炭酸ガス吸収剤に移行して構造式不明の変化物を生じた。残りの被験物質と生成した 2,6-ジ-tert-ブチル-p-ベンゾキノンは微生物により分解されなかった。

5. 備 考

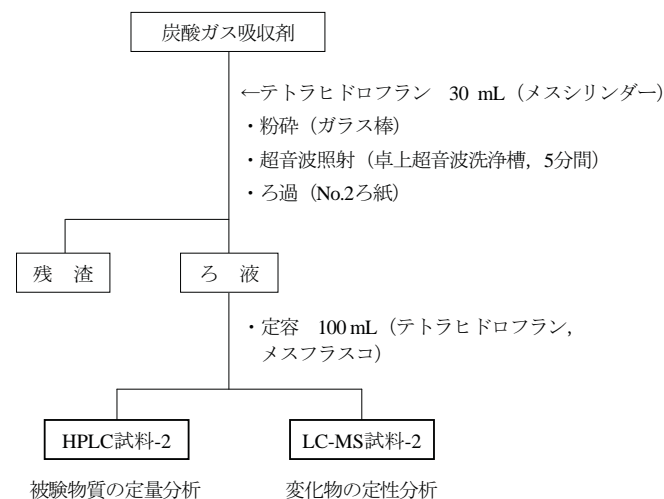
5.1 炭酸ガス吸収剤(ソーダライム)中の被験物質の定量分析及び変化物の定性分析

本試験における被験物質の収支不足、また、炭酸ガス吸収剤が褐色に着色した原因を調査するために、炭酸ガス吸収剤について前処理操作を行い分析に供した。

(1) 分析試料の調製

(水+被験物質)系、(汚泥+被験物質)系及び汚泥ブランク系の試験容器内に装着した炭酸ガス吸収剤について以下のフロースキームに従って前処理操作を行い、被験物質を定量分析するための HPLC 試料並びに変化物を定性分析するための LC-MS 試料を調製した。

フロースキーム



(2) 高速液体クロマトグラフィーによる被験物質の定量分析

(1)で前処理を行って得られた HPLC 試料-2 について、1.5.2(1)(a)に示す定量条件に従って被験物質を分析した。その結果、(水+被験物質)系及び(汚泥+被験物質)系いずれからも被験物質は検出されなかった(下表参照)。

炭酸ガス吸収剤中の被験物質の検出量及び検出率

| | | (水+被験物質)系 | | | | 理論量 |
|---------------------|----|-----------|-----|-----|-----|------|
| | | [1] | [2] | [3] | [4] | |
| 被験物質検出量及び検出率 (HPLC) | mg | 0 | 0 | 0 | 0 | 30.0 |
| | % | 0 | 0 | 0 | 0 | - |

(3) 液体クロマトグラフィー質量分析法による変化物の定性分析

(1)で前処理を行って得られた LC-MS 試料-2 について、1.5.2(2)(a)に示す分析条件に従って変化物の定性分析を行った。その結果、(水+被験物質)系及び(汚泥+被験物質)系における PDA クロマトグラム上の保持時間 13.7 分付近に変化物と考えられるピークが 1 本検出された。このピークについてマスマスペクトルの解析を行ったところ、 $m/z = 408$ 及び 423 のイオンが検出されたが、構造式の推定には至らなかった(下表参照)。

炭酸ガス吸収剤から検出された変化物

| 変化物 | 保持時間 ^a (分) | 検出イオン及び帰属 | 推定分子量 | 推定構造式 |
|-----|-----------------------|----------------------|-------|-------|
| B | 13.7 | 408 (不明) 423 (不明) | 不明 | 不明 |

5.2 炭酸ガス吸収剤の影響確認(予備検討)

炭酸ガス吸収剤の被験物質への影響を確認するために、以下の検討を行った。

(1) 試験液の調製及び培養条件

1.2 に準じて(水+被験物質)系、(汚泥+被験物質)系及び汚泥ブランク系を各 1 点調製した。いずれの系も試験容器内に炭酸ガス吸収剤を装着しなかった。

環境条件

| | |
|---------|---|
| 試験液培養温度 | 約 25°C |
| 試験液培養期間 | 2009 年 9 月 1 日～2009 年 9 月 29 日 (28 日間, 遮光下) |
| 攪拌方法 | マグネチックスターラーによる回転攪拌 |
| 実施場所 | 環境調節室 |

(2) 試験液の前処理及び被験物質の定量分析条件

培養期間終了後、各試験液について 1.5.1 のフロースキームに従い、被験物質を定量分析するための HPLC 試料を調製し、1.5.2(1)に従って分析を行った。

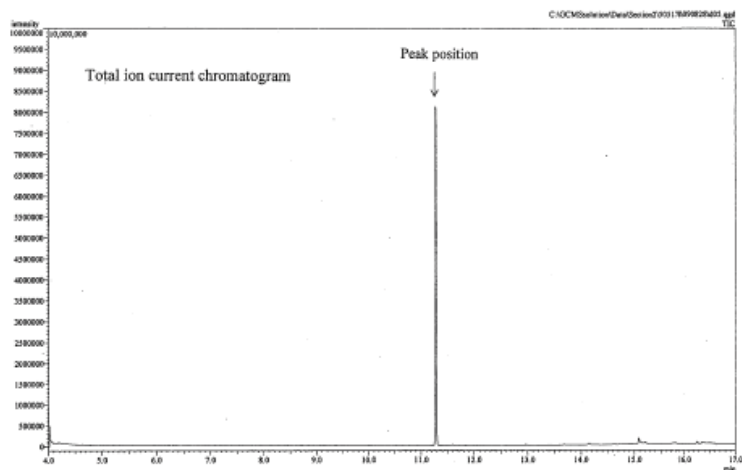
(3) 試験結果

被験物質は(水+被験物質)系及び(汚泥+被験物質)系ともにほぼ理論量残留しており、HPLC クロマトグラム上に変化物と考えられるピークは認められなかった(下表参照)。

試験液中の被験物質の残留量及び残留率

| | | (水+被験物質)系 | (汚泥+被験物質)系 | 理論量 |
|---------------------|----|-----------|------------|------|
| 被験物質残留量及び残留率 (HPLC) | mg | 28.5 | 30.1 | 30.0 |
| | % | 95 | 100 | - |

Operating date : Aug. 28, 2009
 File name : C:\GCMSolution\Data\Section2\505178\090828\405.qgd
 Sample name : Standard solution 10.0 mg/L



Peak No. 1 R-Time: 11.28 (Scan# 874)
 MassPeak: 208 BasePeak: 191 (0.6835)
 RawMode: Averaged 11.25-11.32 (871-879)

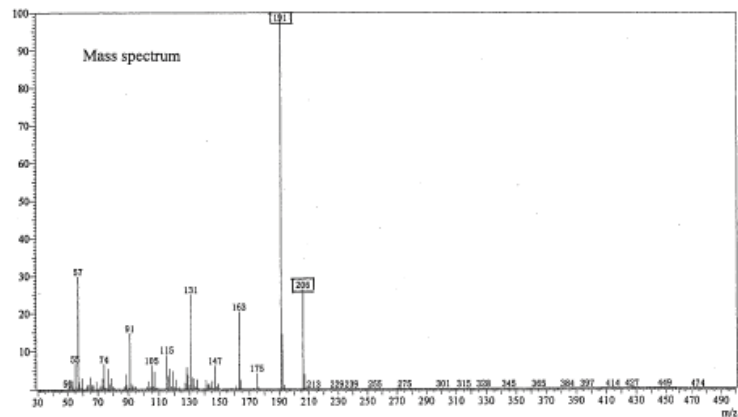


Fig. 2-1 Mass spectrum of test item measured in Kurume Laboratory, Chemicals Evaluation and Research Institute, Japan.

Sample : Standard solution 10.0 mg/L
 Operating date : Aug. 28, 2009
 File name : C:\GCMSolution\Data\Section2\505178\090828\405.qgd

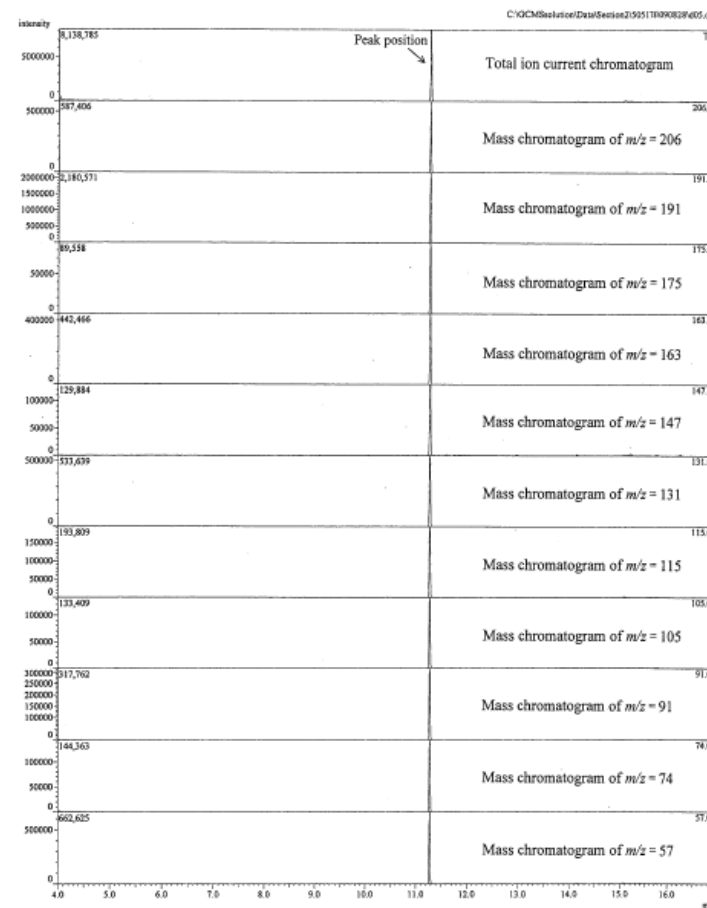
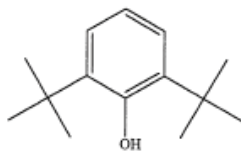
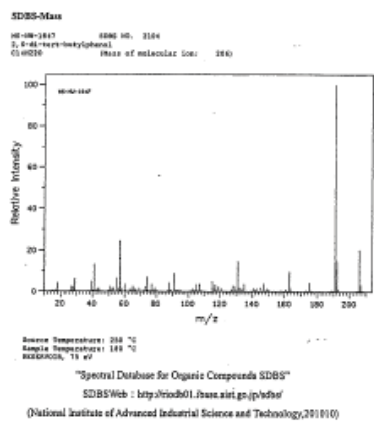


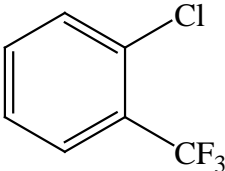
Fig. 2-2 Mass spectrum of test item measured in Kurume Laboratory, Chemicals Evaluation and Research Institute, Japan.



Molecular weight 206

| <i>m/z</i> | Fragment ion |
|------------|--|
| 206 | [M] ⁺⁺ |
| 191 | [M-CH ₃] ⁺ |
| 175 | [M-C ₂ H ₅] ⁺ |
| 163 | [M-C ₃ H ₇] ⁺ |
| 147 | [C ₁₀ H ₁₁ O] ⁺ |
| 131 | [C ₁₀ H ₁₁] ⁺ |
| 115 | [C ₈ H ₃ O] ⁺ |
| 105 | [C ₇ H ₅ O] ⁺ |
| 91 | [C ₆ H ₃ O] ⁺ |
| 74 | [C ₆ H ₂] ⁺⁺ |
| 57 | [C ₄ H ₉] ⁺ |

Fig. 2-3 Mass spectrum of test item (main presumed products) measured in Kurume Laboratory, Chemicals Evaluation and Research Institute, Japan.

| 整理番号 K-560A (3-0053) | | 分解度試験 | | 分解度試験 | | 分解度試験 | | | | | | | | | | | |
|--|-----|--|------|---------------------|-----|---------------------|------|------|--------|---|---|---|---|--|--|--|--|
| 1-クロロ-2-(トリフルオロメチル)ベンゼン | | 事業対象年度 平成21年度 | | 契約 年 月 日 | | 契約 年 月 日 | | | | | | | | | | | |
| (88-16-4) | | 試験期間 21.11.17~22.1.12 | | 試験期間 . . ~ . . | | 試験期間 . . ~ . . | | | | | | | | | | | |
| | | 試験装置 Closed bottle | | 試験装置 標・揮 | | 試験装置 標・揮 | | | | | | | | | | | |
| 構造式(示性式)・物理化学的性状  分子式 C ₇ H ₄ ClF ₃ 分子量 180.55 | | 試験濃度 | | 試験濃度 | | 試験濃度 | | | | | | | | | | | |
| | | 被験物質 4.1 mg/L | | 被験物質 mg/L | | 被験物質 mg/L | | | | | | | | | | | |
| | | 都市下水処理場二次放流水 1滴/L | | 汚泥 mg/L | | 汚泥 mg/L | | | | | | | | | | | |
| | | 本試験期間 4週間 | | 本試験期間 週間 | | 本試験期間 週間 | | | | | | | | | | | |
| | | 試験結果 | | 試験結果 | | 試験結果 | | | | | | | | | | | |
| 純度*1 98.7% (GC) | | 外観 無色透明液体 | | 間接 | | 間接 | | | | | | | | | | | |
| 不純物*1 (物質名, 含有率) 不明成分 1.3% | | 溶解度(対水, その他) - | | 直接 | | 直接 | | | | | | | | | | | |
| 融点 - | | 審査部会 第101回 22年12月17日開催 | | 審査部会 第 回 年 月 日開催 | | 審査部会 第 回 年 月 日開催 | | | | | | | | | | | |
| 沸点 - | | 判定 | | 判定 | | 判定 | | | | | | | | | | | |
| 比重 - | | 備考 1. 回収率 (水+被験物質)系 101% (植種源+被験物質)系 101% 2. 実施機関 ・財団法人化学物質評価研究機構 3. 特記事項 ・BOD分解度(平均値) | | 備考 備考 備考 | | 備考 備考 備考 | | | | | | | | | | | |
| LD50 - | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| IRチャートの有無 (有)・無 | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 用途 | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 生産量(年) 製造及び輸入 - | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 試料 購入先 株式会社ワコーケミカル | | <table border="1"> <tr> <td></td> <td>7日後</td> <td>14日後</td> <td>21日後</td> <td>28日後</td> </tr> <tr> <td>分解度(%)</td> <td>4</td> <td>1</td> <td>2</td> <td>0</td> </tr> </table> | | | 7日後 | 14日後 | 21日後 | 28日後 | 分解度(%) | 4 | 1 | 2 | 0 | | | | |
| | 7日後 | 14日後 | 21日後 | 28日後 | | | | | | | | | | | | | |
| 分解度(%) | 4 | 1 | 2 | 0 | | | | | | | | | | | | | |
| 経済産業公報発表年月日 年 月 日 | | | | | | | | | | | | | | | | | |

*1 ワコーケミカル添付資料による。 *2 溶離液:メタノール/精製水(75/25 v/v)

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---------------------------|----------|-------|--|--|---------------------|----|---------|----------|--|-------|------|--|----------------|--|------|--------|--|---------|--|--|
| 濃縮度試験 | | | | | 事業対象年度 平成21年度 | | | | | 濃縮度試験 | | | | | 毒性試験 | | | | | |
| 試験期間 | | | | | 21.10.30 ~ 21.11.17 | | | | | 試験期間 | | | | | 年月日 | | | | | |
| 試験装置 標・揮 | | LC50値 | | | mg/L(hr)魚種() | | | 試験装置 標・揮 | | LC50値 | | | mg/L(hr)魚種() | | | 依 頼 | | | | |
| 水槽設定濃度 () | | | | | 水槽設定濃度 () | | | | | 経過 | | | | | | | | | | |
| 被験物質 | | 分散剤 | | | 被験物質 | | 分散剤 | | | | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 第1濃度区 | | | | | 第1濃度区 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 第2濃度区 | | | | | 第2濃度区 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 第3濃度区 | | | | | 第3濃度区 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 濃縮倍率 | | 脂質含有率 | | | 開始前 | | % 魚種() | | | | 濃縮倍率 | | 脂質含有率 | | | 開始前 | | % 魚種() | | |
| | | 終了後 | | | % | | | | | | | | 終了後 | | | % | | | | |
| | | 日後 | | | 日後 | | 日後 | | | | 日後 | | 日後 | | | 日後 | | 日後 | | |
| 第1 | 水槽濃度 () | | | | | 第1 | | 水槽濃度 () | | | | | | | | | | | | |
| | 倍率 | | | | | 第1 | | 倍率 | | | | | | | | | | | | |
| 第2 | 水槽濃度 () | | | | | 第2 | | 水槽濃度 () | | | | | | | | | | | | |
| | 倍率 | | | | | 第2 | | 倍率 | | | | | | | | | | | | |
| 第3 | 水槽濃度 () | | | | | 第3 | | 水槽濃度 () | | | | | | | | | | | | |
| | 倍率 | | | | | 第3 | | 倍率 | | | | | | | | | | | | |
| 審査部会 第101回 22年 12月 17日 開催 | | | | | 審査部会 第 回 年 月 日 開催 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 判定結果 | | | | | 判定結果 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 備考 | | | | | 備考 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 分配係数から類推 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| [実施機関] 財団法人化学物質評価研究機構 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

1-クロロ-2-(トリフルオロメチル)ベンゼンの微生物による分解度試験

要 約

試 験 法

本試験は以下の試験法に従って行った。

"OECD Guidelines for Testing of Chemicals"に定める"Ready Biodegradability: Closed Bottle Test (Guideline 301D, July 17, 1992)"

GLP 基準

本試験は以下の基準を適用した。

- (1) 「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準について」（平成 15 年 11 月 21 日、薬食発第 1121003 号、平成 15・11・17 製局第 3 号、環保企発第 031121004 号、平成 20 年 7 月 4 日 最終改正）に規定する「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準」
- (2) "OECD Principles of Good Laboratory Practice" (November 26, 1997)

試 験 条 件

- | | |
|---------------|------------|
| (1) 被験物質濃度 | 4.1 mg/L |
| (2) 植 種 源 濃 度 | 1 滴/L |
| (3) 試 験 液 量 | 100 mL |
| (4) 試験液培養温度 | 20±1℃ |
| (5) 試験液培養方法 | 密栓状態で連続攪拌 |
| (6) 試験液培養期間 | 28 日間（遮光下） |

分解度算出のための測定及び分析

- (1) 溶存酸素 (DO) の測定
- (2) ガスクロマトグラフィー (GC) による被験物質の定量分析

試 験 結 果

| | | (植種源+被験物質)系 | | 平均値 |
|--------------|---|-------------|----|-----|
| | | 1 | 2 | |
| BOD 分解度 | % | 4 | -4 | 0 |
| 被験物質分解度 (GC) | % | -1 | 2 | 0 |

結 論

本試験条件下において、被験物質は微生物により分解されなかった。

1. 分解度試験の実施

1.1 試験の準備

(1) 植種源の採取

| | |
|-------|-----------------|
| 採取植種源 | 都市下水処理場二次放流水 |
| 採取場所 | 福岡県久留米市中央浄化センター |
| 採取日 | 2009年11月18日 |

(2) 植種源の準備

上記で採取した植種源を No.2 ろ紙でろ過し、ろ液を植種源とした。植種源は使用するまで好気状態に保った。

(3) 無機培地の調製

試験法に定められた組成の A 液、B 液、C 液及び D 液それぞれ 1 mL に精製水（高杉製薬製 日本薬局方）を加えて 1 L とする割合で 5 L 混合した。

(4) 植種源の添加

無機培地 1 L に対し、(2) で調製した植種源を先の尖ったピペットで 1 滴の割合で添加した。

(5) 対照物質

安息香酸ナトリウム（Aldrich 製 ロット番号 11007MB）を用いた。

1.2 試験液の調製

試験容器を 35 個用意し、試験液を下記の方法で調製した。これらの試験液について、1.3 の条件で培養を行った。

(1) (水+被験物質) 系 (2 個)

試験容器に精製水を満たし、被験物質濃度が 4.1 mg/L になるように供試試料をマイクロシリンジで 0.30 μ L (被験物質 0.41 mg) 分取して添加した。

(2) (植種源+被験物質) 系 (12 個)

試験容器に植種源を含む無機培地を満たし、被験物質濃度が 4.1 mg/L になるように供試試料をマイクロシリンジで 0.30 μ L (被験物質 0.41 mg) 分取して添加した。

(3) (植種源+安息香酸ナトリウム) 系 (10 個)

植種源を含む無機培地で安息香酸ナトリウム 3.00 mg/L 溶液を調製し、これを試験容器に満たした。

(4) 植種源ブランク系 (11 個)

試験容器に植種源を含む無機培地を満たした。

1.3 試験液培養装置及び培養条件

(1) 試験液培養装置

| | |
|---------|-------------------------|
| 試験液培養装置 | インキュベーター（三洋電機製 MIR-553） |
| 試験容器 | 100 mL 容培養瓶 |

(2) 培養条件

| | |
|-----------------|-------------------------|
| 温度 | 20 \pm 1 $^{\circ}$ C |
| 試験液培養方法及びその選択理由 | 培養方法 密栓状態で連続攪拌した。 |
| 選択理由 | 被験物質は試験液に溶解しないため。 |
| 期間 | 28 日間（遮光下） |
| 実施場所 | 機器室 1A |

(3) 観察

培養期間中、試験液の状況を毎日目視観察した。

1.4 溶存酸素 (DO) の測定

(水+被験物質) 系を除く各試験液について JIS K 0102-2008 の 32.1 により DO を測定し、生物化学的酸素消費量 (BOD) を算出した。

分析日及び連数

(植種源+被験物質) 系

| | |
|-----|---------------------------|
| 分析日 | 試験液培養開始時、7、14、21 及び 28 日後 |
| 連数 | n=2 |

(植種源+安息香酸ナトリウム) 系

| | |
|-----|---------------------------|
| 分析日 | 試験液培養開始時、7、14、21 及び 28 日後 |
| 連数 | n=2 |

植種源ブランク系

| | |
|-----|---------------------------|
| 分析日 | 試験液培養開始時、7、14、21 及び 28 日後 |
| 連数 | n=2 |

1.5 試験液の分析

培養期間終了後、試験液中の被験物質について分析した。

分析連数

| | |
|---------------------------|-----|
| (水+被験物質) 系及び (植種源+被験物質) 系 | n=2 |
| 植種源ブランク系 | n=1 |

1.5.3 回収試験及びブランク試験

前述した前処理における試験液からの被験物質の回収率を求めるため、1.2 に準じて調製した（水＋被験物質）系及び（植種源＋被験物質）系の試験液について 1.5.1 及び 1.5.2 に従い、回収試験を行った。また、1.2 に準じて調製した植種源ブランク系の試験液について回収試験と同じ操作によりブランク試験を行った。回収試験については各 2 点、ブランク試験については 1 点測定した。この結果、ブランク試験においてクロマトグラム上、被験物質ピーク位置にはピークは認められなかった。分析操作における各 2 点の回収率及び平均回収率は下記のとおりであり、平均回収率を試験液中の被験物質濃度を求める場合の補正值とした。

| | | | |
|----------------|-------------|----|------|
| （水＋被験物質）系回収率 | 100%, 103% | 平均 | 101% |
| （植種源＋被験物質）系回収率 | 103%, 99.5% | 平均 | 101% |

1.6 分解度の算出法

分解度は下記の式に基づき算出し、小数点以下 1 ケタ目を丸めて整数位で表示した。

(1) BOD 分解度

$$\text{分解度 (\%)} = \frac{\text{BOD}_x}{\text{TOD}} \times 100$$

BOD_x : x 日後の（植種源＋被験物質）系の生物化学的酸素消費量（測定値：mgO₂/L）

TOD : 被験物質が完全に酸化された場合に必要とされる理論的酸素消費量
（計算値：mgO₂/L）

$$\text{BOD}_x = (m_{b(0)} - m_{b(x)}) - (m_{b(0)} - m_{b(x)})$$

m_{b(x)} : 植種源ブランク系における X 日後の溶存酸素濃度の平均値（mgO₂/L）

m_(x) : （植種源＋被験物質）系における X 日後の試験液ごとの溶存酸素濃度
（mgO₂/L）

(2) 被験物質分解度

$$\text{分解度 (\%)} = \frac{S_w - S_s}{S_w} \times 100$$

S_s : （植種源＋被験物質）系における被験物質の残留量（測定値：mg）

S_w : （水＋被験物質）系における被験物質の残留量の平均値（測定値：mg）

1.7 数値の取扱い

数値の丸め方は、JIS Z 8401：1999 規則 B に従った。

2. 試験条件の確認

試験の有効性の基準値と本試験における値を下表に示す。本試験における値はいずれも基準値を満たしていることから、本試験は有効であった。

| | 本試験における値 | 基準値 |
|-------------------------------|-----------------------------|----------------------------|
| 被験物質分解度の最大値と最小値の差 | 3% | 20%未満 |
| BOD から求めた安息香酸ナトリウムの 14 日後の分解度 | 66%, 76% | 60%以上 |
| 28 日後の植種源ブランクの酸素消費量*2 | 0.61 mgO ₂ /L | 1.5 mgO ₂ /L 以下 |
| 容器中の残留酸素濃度 | 4.30 mgO ₂ /L 以上 | 0.5 mgO ₂ /L 以上 |

*2 算出法：（0 日後の平均溶存酸素濃度）－（28 日後の溶存酸素濃度の低い方）

3. 試験成績の信頼性に影響を及ぼしたと思われる環境要因

当該要因はなかった。

4. 試験結果

4.1 試験液の分析結果

28 日後の分析結果は下記のとおりであった。

| | | （水＋被験物質）系 | | （植種源＋被験物質）系 | | 理論量 |
|-------------------|---------------------|-----------|------|-------------|-------|------|
| | | 1 | 2 | 1 | 2 | |
| BOD*3 | mgO ₂ /L | - | - | 0.24 | -0.22 | 5.81 |
| 被験物質残留量及び残留率 (GC) | mg | 0.41 | 0.41 | 0.41 | 0.40 | 0.41 |
| | % | 99 | 99 | 100 | 97 | - |

*3 植種源ブランク系の生物化学的酸素消費量を差し引いた値。

4.2 分解度

分解度は下記のとおりであった。

| | | （植種源＋被験物質）系 [] 内は平均値 | | | |
|--------------|---|-----------------------|-------|-------|-------|
| | | 7 日後 | 14 日後 | 21 日後 | 28 日後 |
| BOD 分解度 | % | 6 | 2 | 4 | 4 |
| | | 2 | -1 | 1 | -4 |
| | | [4] | [1] | [2] | [0] |
| 被験物質分解度 (GC) | % | - | - | - | -1 |
| | | - | - | - | 2 |
| | | | | | [0] |

4.3 考 察

(水+被験物質)系、(植種源+被験物質)系共に被験物質はほぼ理論量残留し、28日後のBOD分解度が平均0%であったことから、本試験条件下において、被験物質は分解されなかったと考えられる。

なお、上記結果及びGCクロマトグラム上に被験物質以外のピークは認められなかったことから、変化物は生成しなかったと判断されたため分析対象としなかった。

4.4 結 論

本試験条件下において、被験物質は微生物により分解されなかった。

1-クロロ-2-(トリフルオロメチル)ベンゼンの1-オクタノールと水との間の
分配係数試験 (HPLC法)

要 約

試 験 法

本試験は以下の試験法に従って行った。

- (1) 「新規化学物質等に係る試験の方法について」(平成15年11月21日、薬食発第1121002号、平成15・11・13製局第2号、環保企発第031121002号、平成18年11月20日最終改正)に規定する〈1-オクタノールと水との間の分配係数測定試験〉
- (2) "OECD Guidelines for the Testing of Chemicals"に定める"Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method (Guideline 117, April 13, 2004)"

GLP 基準

本試験は以下の基準を適用した。

- (1) 「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準について」(平成15年11月21日、薬食発第1121003号、平成15・11・17製局第3号、環保企発第031121004号、平成20年7月4日最終改正)に規定する「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準」
- (2) "OECD Principles of Good Laboratory Practice" (November 26, 1997)

試 験 条 件

- | | |
|-------------|--|
| (1) 試 験 装 置 | 高速液体クロマトグラフ 溶離液：メタノール/精製水 (75/25 v/v) |
| (2) 試 験 温 度 | 25±1℃ |

試験結果

(1) 測定結果

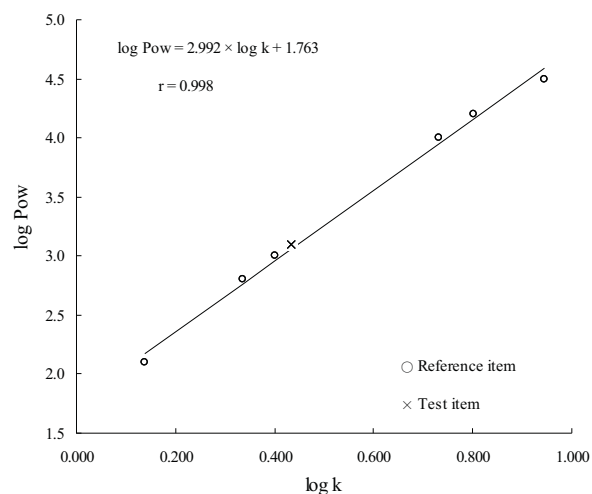
| 測定物質名称 | | t _R | k | log k | log Pow |
|--------|-----------------------------------|----------------|-------------------------------|-------|---------|
| 標準物質 | チオ尿素 (デッドタイム測定用: t ₀) | 1.73 | Average t ₀ = 1.73 | | |
| | | 1.73 | | | |
| | ベンゼン | 4.10 | 1.370 | 0.137 | 2.1 |
| | | 4.10 | 1.370 | 0.137 | 2.1 |
| | クロロベンゼン | 5.47 | 2.162 | 0.335 | 2.8 |
| | | 5.47 | 2.162 | 0.335 | 2.8 |
| | ブロモベンゼン | 6.08 | 2.514 | 0.400 | 3.0 |
| | | 6.08 | 2.514 | 0.400 | 3.0 |
| | ピフェニル | 11.07 | 5.399 | 0.732 | 4.0 |
| | | 11.08 | 5.405 | 0.733 | 4.0 |
| | 1,2,4-トリクロロベンゼン | 12.67 | 6.324 | 0.801 | 4.2 |
| | | 12.67 | 6.324 | 0.801 | 4.2 |
| | フェナントレン | 16.93 | 8.786 | 0.944 | 4.5 |
| | | 16.95 | 8.798 | 0.944 | 4.5 |
| 被験物質 | 1-クロロ-2-(トリフルオロメチル)ベンゼン | 6.42 | 2.711 | 0.433 | 3.1 |
| | | 6.42 | 2.711 | 0.433 | 3.1 |

t₀ : Dead time (デッドタイム) (min)

t_R : Retention time (保持時間) (min)

k (保持係数) = (t_R - t₀) / t₀

(2) 相関図及び回帰式 (相関係数を含む)



(3) 被験物質の分配係数

| log Pow | | 平均値 |
|---------|-----|-----|
| 測定値 | | |
| 3.1 | 3.1 | 3.1 |

1. 試験の実施

1.1 測定条件

(1) 試験装置

| | |
|-------|--|
| 機器 | 高速液体クロマトグラフ 島津製作所製 LC-2010 AHT (紫外可視分光検出器内蔵) |
| カラム | L-column ODS (15 cm×4.6 mm I.D., 化学物質評価研究機構製) |
| カラム温度 | 25°C |
| 溶離液 | メタノール/精製水 (75/25 v/v) |
| 流量 | 1 mL/min |
| 測定波長 | 標準物質 210 nm |
| | 被験物質 210 nm |
| 注入量 | 10 μL |
| 検出器出力 | 1 V/AU |

(2) 試験温度

25±1°C

1.2 試験操作

(1) 標準物質溶液の調製

標準物質としてベンゼン、クロロベンゼン、ブロモベンゼン、ピフェニル、1,2,4-トリクロロベンゼン及びフェナントレンを使用した。デッドタイムの測定用物質としてチオ尿素を使用した。これら6種の標準物質及びチオ尿素それぞれ約20 mgを電子分析天びんではかりとり、メタノールに溶解してそれぞれ約1000 mg/Lの溶液を調製した。これらの溶液を混合し、溶離液で希釈して分配係数測定のための標準物質溶液を調製した。各標準物質濃度は以下のとおりとした。

| 標準物質 | | | 濃度 (mg/L) |
|-----------------|--------|-----------|-----------|
| 名称 | 純度 (%) | log Pow 値 | |
| チオ尿素 | 98.0以上 | デッドタイム測定用 | 約 5 |
| ベンゼン | 99.7 | 2.1 | 約 10 |
| クロロベンゼン | 99.8 | 2.8 | 約 10 |
| ブロモベンゼン | 98.0以上 | 3.0 | 約 10 |
| ピフェニル | 98.0以上 | 4.0 | 約 5 |
| 1,2,4-トリクロロベンゼン | 99 | 4.2 | 約 10 |
| フェナントレン | 98 | 4.5 | 約 10 |

(2) 被験物質溶液の調製

供試試料約20 mgを電子分析天びんではかりとり、メタノールに溶解して約1000 mg/Lの被験物質原液を調製した。これを溶離液で希釈して約10 mg/Lの被験物質溶液とした。

(3) 標準物質の測定及び回帰直線の作成

調製した標準物質溶液を 1.1(1)の試験装置に注入し、標準物質ピークの保持時間を 2 回測定した。保持時間から、標準物質の保持係数 (k) を以下の式に従って算出した。次に標準物質の分配係数及び保持係数の対数値から、最小二乗法により回帰直線を作成した。

$$k = \frac{t_R - t_0}{t_0}$$

t_R : 標準物質の保持時間 (分)

t_0 : デッドタイム (分) (2回の平均値)

$$\log \text{Pow} = a \times \log k + b$$

a : 直線回帰式の傾き

b : 直線回帰式の切片

(4) 被験物質の測定

調製した被験物質溶液を 1.1(1)の試験装置に注入し、被験物質ピークの保持時間を 2 回測定した。また、溶媒ブランク液を 1 回測定し、被験物質ピーク位置にピークがないことを確認した。

1.3 分配係数の算出

被験物質ピークの保持時間から保持係数を求め、作成した直線回帰式を用いて被験物質の分配係数を算出した。算出した分配係数の平均値を被験物質の分配係数とした。分配係数は対数表示とした。

1.4 数値の取扱い

数値の丸め方は JIS Z 8401 : 1999 規則 B の方法に従い、小数点以下 1 ケタで表示した。

2. 試験成績の信頼性に影響を及ぼしたと思われる環境要因

当該要因はなかった。

3. 試験結果

3.1 測定結果

| 測定物質名称 | | t_R | k | log k | log Pow |
|--------|--------------------------|-------|----------------------|-------|---------|
| 標 | チオ尿素 (デッドタイム測定用: t_0) | 1.73 | Average $t_0 = 1.73$ | | |
| | | 1.73 | | | |
| 準 | ベンゼン | 4.10 | 1.370 | 0.137 | 2.1 |
| | | 4.10 | 1.370 | 0.137 | 2.1 |
| 物 | クロロベンゼン | 5.47 | 2.162 | 0.335 | 2.8 |
| | | 5.47 | 2.162 | 0.335 | 2.8 |
| 質 | ブロモベンゼン | 6.08 | 2.514 | 0.400 | 3.0 |
| | | 6.08 | 2.514 | 0.400 | 3.0 |
| 質 | 1,2,4-トリクロロベンゼン | 11.07 | 5.399 | 0.732 | 4.0 |
| | | 11.08 | 5.405 | 0.733 | 4.0 |
| 質 | フェナントレン | 12.67 | 6.324 | 0.801 | 4.2 |
| | | 12.67 | 6.324 | 0.801 | 4.2 |
| 被験物質 | 1-クロロ-2-(トリフルオロメチル)ベンゼン | 16.93 | 8.786 | 0.944 | 4.5 |
| | | 16.95 | 8.798 | 0.944 | 4.5 |
| 被験物質 | 1-クロロ-2-(トリフルオロメチル)ベンゼン | 6.42 | 2.711 | 0.433 | 3.1 |
| | | 6.42 | 2.711 | 0.433 | 3.1 |

t_0 : Dead time (デッドタイム) (min)

t_R : Retention time (保持時間) (min)

k (保持係数) = $(t_R - t_0) / t_0$

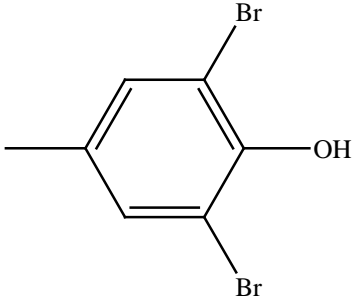
3.2 測定条件における回帰直線の回帰式

$$\log \text{Pow} = 2.992 \times \log k + 1.763$$

3.3 被験物質の分配係数

| log Pow | | |
|---------|-----|-----|
| 測定値 | 平均値 | |
| 3.1 | 3.1 | 3.1 |

分配係数計算ソフト [ClogP v4.0 (BioByte Corp.)及び Kowwin v1.67 (U.S. Environmental Protection Agency)] による予備推定値は、それぞれ log Pow=3.54 及び 3.60 であった。

| | | | |
|---|---|--|-----------------------------------|
| 整理番号 K-1502 (3-2851) | 分解度試験 | 分解度試験 | 分解度試験 |
| 2,6-ジブロモ-p-クレゾール | 事業対象年度 平成21年度 | 契約 年 月 日 | 契約 年 月 日 |
| (2432-14-6) | 試験期間 21.12.8~22.2.25 | 試験期間 . . . ~ . . . | 試験期間 . . . ~ . . . |
| | 試験装置 (標)・揮 | 試験装置 標・揮 | 試験装置 標・揮 |
| 構造式(示性式)・物理化学的性状  分子式 C ₇ H ₆ Br ₂ O 分子量 265.93 | 試験濃度 | 試験濃度 | 試験濃度 |
| | 被験物質 100 mg/L | 被験物質 mg/L | 被験物質 mg/L |
| | 汚泥 30 mg/L | 汚泥 mg/L | 汚泥 mg/L |
| | 本試験期間 4 週間 | 本試験期間 週間 | 本試験期間 週間 |
| | 試験結果 間接 BOD -10, -6, -5 (0)% | 試験結果 間接 | 試験結果 間接 |
| | 試験結果 直接 TOC -10, -11, -9 (0)% HPLC -3, -7, -3 (0)% | 試験結果 直接 | 試験結果 直接 |
| 純度*1 96.9% | 外観 微黄色結晶性粉末 | | |
| 不純物*1 (物質名, 含有率) 不明成分 3.1% | 溶解度(対水, その他) - | 審査部会 第101回 22年12月17日開催 | 審査部会 第 回 年 月 日開催 |
| 融点 - | | 判定 | 判定 |
| 沸点 - | 1-オクタノール/水分配係数 log Pow = 3.3 (HPLC法)*2 | 備考 1. 回収率* (水+被験物質)系 100% (汚泥+被験物質)系 100% ※試験液を直接分析機器に導入。 2. 実施機関 ・財団法人化学物質評価研究機構 3. 特記事項 ・分解度の平均値が負の値に算出されたため、0と表記した。 | |
| 比重 - | | | 備考 ・一部の被験物質は試験液から炭酸ガス吸収剤に移行した。 |
| LD50 - | 解離定数 pKa = 7.20 | | |
| IRチャートの有無 (有)・無 | | | |
| 用途 - | | | |
| 生産量(年) 製造及び輸入 - | | | |
| 試料 購入先 Acros Organics | | | |
| 経済産業公報発表年月日 年 月 日 | | | |

*1 Acros Organics 添付資料による。 *2 溶離液:メタノール/りん酸緩衝液 (pH5.0) (75/25 v/v)

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---------------------------|----------|-----------------------|--|--|-------------------|----|-----------------------|--|--|-------|--|----|--|--|------|--|
| 濃縮度試験 | | | | | 事業対象年度 平成21年度 | | | | | 濃縮度試験 | | | | | 毒性試験 | |
| 試験期間 | | | | | 22.2.24 ~ 22.3.9 | | | | | 試験期間 | | | | | 年月日 | |
| 試験装置 標・揮 | | LC50値 mg/L(hr)魚種() | | | 試験装置 標・揮 | | LC50値 mg/L(hr)魚種() | | | 依頼 | | 経過 | | | | |
| 水槽設定濃度 () | | | | | 水槽設定濃度 () | | | | | | | | | | | |
| 被験物質 | | 分散剤 | | | 被験物質 | | 分散剤 | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 第1濃度区 | | | | | 第1濃度区 | | | | | | | | | | | |
| 第2濃度区 | | | | | 第2濃度区 | | | | | | | | | | | |
| 第3濃度区 | | | | | 第3濃度区 | | | | | | | | | | | |
| 濃縮倍率 | | 脂質含有率 開始前 終了後 % 魚種() | | | 濃縮倍率 | | 脂質含有率 開始前 終了後 % 魚種() | | | | | | | | | |
| | | 日後 日後 日後 日後 日後 | | | | | 日後 日後 日後 日後 日後 | | | | | | | | | |
| 第1 | 水槽濃度 () | | | | | 第1 | 水槽濃度 () | | | | | | | | | |
| | 倍率 | | | | | | 倍率 | | | | | | | | | |
| 第2 | 水槽濃度 () | | | | | 第2 | 水槽濃度 () | | | | | | | | | |
| | 倍率 | | | | | | 倍率 | | | | | | | | | |
| 第3 | 水槽濃度 () | | | | | 第3 | 水槽濃度 () | | | | | | | | | |
| | 倍率 | | | | | | 倍率 | | | | | | | | | |
| 審査部会 第101回 22年 12月 17日 開催 | | | | | 審査部会 第 回 年 月 日 開催 | | | | | | | | | | | |
| 判定結果 | | | | | 判定結果 | | | | | | | | | | | |
| 備考 | | | | | 備考 | | | | | | | | | | | |
| 分配係数から類推 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| [実施機関] 財団法人化学物質評価研究機構 | | | | | | | | | | | | | | | | |

2,6-ジブロモ-4-メチルフェノールの微生物による分解度試験

要 約

試 験 法

本試験は以下の試験法に従って行った。

- (1) 「新規化学物質等に係る試験の方法について」(平成 15 年 11 月 21 日、薬食発第 1121002 号、平成 15・11・13 製局第 2 号、環企発第 031121002 号、平成 18 年 11 月 20 日 最終改正) に規定する〈微生物等による化学物質の分解度試験〉
- (2) "OECD Guidelines for Testing of Chemicals"に定める"Ready Biodegradability: Modified MITI Test (I) (Guideline 301C, July 17, 1992)"

GLP 基準

本試験は以下の基準を適用した。

- (1) 「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準について」(平成 15 年 11 月 21 日、薬食発第 1121003 号、平成 15・11・17 製局第 3 号、環企発第 031121004 号、平成 20 年 7 月 4 日 最終改正) に規定する「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準」
- (2) "OECD Principles of Good Laboratory Practice" (November 26, 1997)

試 験 条 件

- | | |
|-------------|---------------------|
| (1) 被験物質濃度 | 100 mg/L |
| (2) 活性汚泥濃度 | 30 mg/L (懸濁物質濃度として) |
| (3) 試 験 液 量 | 300 mL |
| (4) 試験液培養温度 | 25±1℃ |
| (5) 試験液培養期間 | 28 日間 (遮光下) |

分解度算出のための測定及び分析

- (1) 閉鎖系酸素消費量測定装置による生物化学的酸素消費量 (BOD) の測定
- (2) 全有機炭素分析法 (TOC) による溶存有機炭素 (DOC) の定量分析
- (3) 高速液体クロマトグラフィー (HPLC) による被験物質の定量分析

試 験 結 果

| | | (汚泥+被験物質) 系 | | | |
|-------------------|---|-------------|-----|-----|------------|
| | | [2] | [3] | [4] | 平 均 |
| BOD 分解度 | % | -10 | -6 | -5 | 0 (-7) *1 |
| DOC 分解度 | % | -10 | -11 | -9 | 0 (-10) *1 |
| 被験物質分解度 (HPLC) | % | -3 | -7 | -3 | 0 (-4) *1 |

*1 分解度の平均値が負の値に算出されたため、平均値を 0 としカッコ内にその計算値を示した。

結 論

本試験条件下において、被験物質は微生物により分解されなかった。

1. 分解度試験の実施

1.1 試験の準備

(1) 活性汚泥

試験法(1)に従い、財団法人化学物質評価研究機構において採集、調製及び管理を行った活性汚泥（採集時期及び使用開始日は下記参照）を使用した。使用に際しては、合成下水（グルコース、ペプトン、リン酸二水素カリウムを精製水に溶解し、pHを7.0±1.0に調整したもの）を添加して18.5時間後のものを用いた。

採集時期 2009年9月

使用開始日 2009年10月5日

(2) 活性汚泥の懸濁物質濃度の測定

活性汚泥の添加量を決定するために、懸濁物質濃度を測定した。

測定方法 JIS K 0102-2008 の 14.1 に準じて行った。

測定実施日 2009年12月7日

測定結果 活性汚泥の懸濁物質濃度は3160 mg/Lであった。

(3) 基礎培養基の調製

JIS K 0102-2008 の 21.1 に定められた組成の A 液、B 液、C 液及び D 液それぞれ 3 mL に精製水（高杉製薬製 日本薬局方）を加えて 1 L とする割合で 5 L 調製し、pH を 7.0 に調整した。

(4) 対照物質

アニリン（和光純薬工業製 試薬特級 ロット番号 KWQ3949）を用いて活性汚泥が十分な活性度を有することを確認した。

1.2 試験液の調製

試験容器を 6 個用意し、試験液を下記の方法で調製した。これらの試験液について、1.3 の条件で培養を行った。

(1) 被験物質及びアニリンの添加

(a) (水+被験物質)系 (1 個, 試験容器 [1])

被験物質濃度が 100 mg/L になるように、試験容器に精製水 300 mL 及び供試試料 30 mg を入れた。供試試料は電子分析天びんで正確にはかりとり添加した。23 時間攪拌後 pH を測定した。

(b) (汚泥+被験物質)系 (3 個, 試験容器 [2] [3] [4])

被験物質濃度が 100 mg/L になるように、試験容器に基礎培養基 [300 mL から活性汚泥添加量 (2.85 mL) を差し引いた量] 及び供試試料 30 mg を入れた。供試試料は電子分析天びんで正確にはかりとり添加した。23 時間攪拌後 pH を測定した。

(c) (汚泥+アニリン)系 (1 個, 試験容器 [6])

試験容器に基礎培養基 [300 mL から活性汚泥添加量 (2.85 mL) を差し引いた量] を入れ、23 時間攪拌後、アニリンの濃度が 100 mg/L となるようにアニリン 29.5 µL (30 mg) を入れた。アニリンはマイクロシリンジで分取して添加した。

(d) 汚泥ブランク系 (1 個, 試験容器 [5])

試験容器に基礎培養基 [300 mL から活性汚泥添加量 (2.85 mL) を差し引いた量] を入れ、23 時間攪拌した。

(2) 活性汚泥の接種

(b)、(c)及び(d)の試験液に懸濁物質濃度として30mg/Lになるように活性汚泥を添加した。

1.3 試験液培養装置及び培養条件

(1) 試験液培養装置

閉鎖系酸素消費量測定装置

恒温槽及び測定ユニット 旭テクネイオン製

データ処理装置 旭テクネイオン製

試験容器 300 mL 用培養瓶 (改良型培養瓶)

炭酸ガス吸収剤 ソーダライム, No.1 (和光純薬工業製 二酸化炭素吸収用)

(2) 培養条件

温度 25±1℃

期間 28 日間 (遮光下)

攪拌方法 マグネチックスターラーによる回転攪拌

(3) 実施場所

機器室 1A

1.4 観察、測定等

(1) 観察

培養期間中、試験液の状況を毎日目視観察した。

(2) 生物化学的酸素消費量 (BOD) の測定

培養期間中、試験液の BOD の変化を連続的に閉鎖系酸素消費量測定装置で測定した。また、閉鎖系酸素消費量測定装置の恒温槽内の温度を毎日記録した。

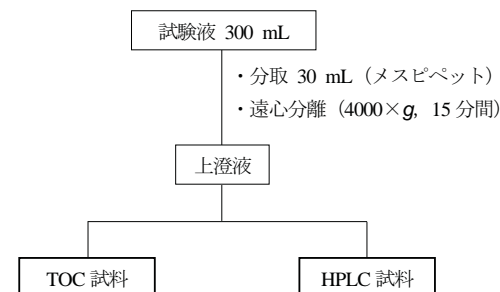
1.5 試験液の分析

培養期間終了後、試験液中の溶存有機炭素 (DOC) 及び被験物質について分析した。なお、(水+被験物質)系及び(汚泥+被験物質)系の試験液の pH を測定した。

1.5.1 試験液の前処理

(水+被験物質)系、(汚泥+被験物質)系及び汚泥ブランク系の試験液について以下のフロースキームに従って前処理操作を行い、DOC を分析するための全有機炭素分析法 (TOC) 試料並びに被験物質を分析するための高速液体クロマトグラフィー (HPLC) 試料を調製した。

フロースキーム



1.5.2 定量分析

(1) DOCの定量分析

TOC 試料中の DOC 濃度は、全炭素 (TC) 濃度から無機炭素 (IC) 濃度を差し引いて求めた。TC 濃度及び IC 濃度は TC 標準溶液 80.0 mg/C/L 及び IC 標準溶液 40.0 mg/C/L と TOC 試料のピーク面積とを比較し比例計算して求めた。なお、TC 標準溶液はフタル酸水素カリウムを精製水に溶解し、IC 標準溶液は炭酸水素ナトリウム及び炭酸ナトリウムを精製水に溶解して調製した。

定量下限濃度は DOC 濃度 1.0 mg/C/L とした。

定量条件

| | |
|-----------|---------------------------------------|
| 機 器 | 全有機炭素計 島津製作所製 TOC-V _{CPH} |
| T C 炉 温 度 | 680°C |
| 流 量 | 150 mL/min |
| 注 入 量 | 50 µL |

(2) 被験物質の定量分析

HPLC 試料中の被験物質の濃度は、クロマトグラム上で得られた標準溶液 100 mg/L のピーク面積と HPLC 試料のピーク面積とを比較し、比例計算して求めた。

ピーク面積の定量下限は、ノイズレベルを考慮して 3000 µV・sec (被験物質濃度 0.98 mg/L) とした。

(a) 定量条件

| | |
|-------------|--|
| 機 器 | 高速液体クロマトグラフ |
| ポ ン プ | 島津製作所製 LC-10AD _{VP} |
| 紫外可視分光検出器 | 島津製作所製 SPD-10AV _{VP} |
| カラムオープン | 島津製作所製 CTO-10AC _{VP} |
| オートインジェクター | 島津製作所製 SIL-10AD _{VP} |
| システムコントローラー | 島津製作所製 SCL-10A _{VP} |
| デガッサー | 島津製作所製 DGU-12AM |
| カ ラ ム | Acentis Express C18 (5 cm×2.1 mm I.D., SUPELCO 製) |
| カ ラ ム 温 度 | 40°C |
| 溶 離 液 | アセトニトリル/超純水 (50/50 v/v) |
| 流 量 | 0.4 mL/min |
| 測 定 波 長 | 220 nm |
| 注 入 量 | 1 µL |
| 検 出 器 出 力 | 1 V/AU |

(b) 標準溶液の調製

供試試料 100 mg を正確にはかりとり、アセトニトリルに溶解して 10000 mg/L の被験物質溶液を調製した。これを精製水で希釈して 100 mg/L の標準溶液とした。

(c) 検量線の作成

(b)の標準溶液の調製と同様にして 25.0、50.0 及び 100 mg/L の標準溶液を調製した。これらを(a)の定量条件に従って分析し、得られたそれぞれのクロマトグラム上のピーク面積と濃度により検量線を作成した。

1.6 分解度の算出法

分解度は下記の式に基づき算出し、小数点以下 1 ケタ目を丸めて整数位で表示した。

(1) BOD 分解度

$$\text{分解度 (\%)} = \frac{\text{BOD} - \text{B}}{\text{TOD}} \times 100$$

BOD : (汚泥+被験物質)系の生物化学的酸素消費量 (測定値: mg)

B : 汚泥ブランク系の生物化学的酸素消費量 (測定値: mg)

TOD : 被験物質が完全に酸化された場合に必要とされる理論的酸素消費量 (計算値: mg)

(2) DOC 分解度

$$\text{分解度 (\%)} = \frac{\text{DOC}_w - \text{DOC}_s}{\text{DOC}_w} \times 100$$

DOC_s : (汚泥+被験物質)系における溶存有機炭素の残留量 (測定値: mgC)

DOC_w : (水+被験物質)系における溶存有機炭素の残留量 (測定値: mgC)

(3) 被験物質分解度

$$\text{分解度 (\%)} = \frac{\text{S}_w - \text{S}_s}{\text{S}_w} \times 100$$

S_s : (汚泥+被験物質)系における被験物質の残留量 (測定値: mg)

S_w : (水+被験物質)系における被験物質の残留量 (測定値: mg)

1.7 数値の取扱い

数値の丸め方は、JIS Z 8401 : 1999 規則 B に従った。

2. 試験条件の確認

試験の有効性の基準値と本試験における値を下表に示す。本試験における値はいずれも基準値を満たしたことから、本試験は有効であった。

| | | 本試験における値 | 基準値 |
|---------------|---------------|----------|--------------------------|
| 分解度の最大値と最小値の差 | BOD 分解度 | 5% | 20%未満 |
| | DOC 分解度 | 2% | |
| | 被 験 物 質 分 解 度 | 4% | |
| アニリンのBOD分解度 | 7日後 | 59% | 40%以上 |
| | 14日後 | 75% | 65%以上 |
| 汚泥ブランク系のBOD値 | 28日後 | 4.9 mg | 18 mg 未満 (60 mg/L 未満) |

3. 試験成績の信頼性に影響を及ぼしたと思われる環境要因
当該要因はなかった。

4. 試験結果

4.1 試験液の状況

試験液の状況は下記のとおりであった。

| | 試験液 | 状 況 | pH |
|-------|---------------|--|-------------------------------|
| 培養開始時 | (水 + 被験物質) 系 | 被験物質は溶解した。 試験液は無色であった。 | [1] 5.4 |
| | (汚泥 + 被験物質) 系 | 被験物質は溶解した。 試験液は無色であった。 | [2] 6.8 [3] 6.8 [4] 6.8 |
| 培養終了時 | (水 + 被験物質) 系 | 不溶物は認められなかった。 試験液は無色であった。 | [1] 5.5 |
| | (汚泥 + 被験物質) 系 | 汚泥以外の不溶物は認められなかった。 汚泥の増殖は認められなかった。 試験液は無色であった。 | [2] 7.0 [3] 7.0 [4] 7.0 |

4.2 試験液の分析結果

28日後の分析結果は下記のとおりであった。

| | | (水 + 被験物質) 系 | (汚泥 + 被験物質) 系 | | | | 理論量 |
|---------------------|-----|--------------|---------------|------|------|-------------------|-----|
| | | [1] | [2] | [3] | [4] | | |
| BOD ^{*2} | mg | 1.6 | -2.9 | -1.7 | -1.5 | 28.8 | |
| DOC 残留量及び残留率 | mgC | 7.9 | 8.7 | 8.7 | 8.6 | 8.8 ^{*3} | |
| | % | 90 | 99 | 99 | 98 | - | |
| 被験物質残留量及び残留率 (HPLC) | mg | 27.2 | 27.9 | 29.0 | 28.1 | 30.0 | |
| | % | 91 | 93 | 97 | 94 | - | |

*2 (汚泥 + 被験物質) 系は、汚泥ブランク系の値を差し引いて表示した。

*3 100 mg/L の被験物質溶液 (n=3) の DOC 実測濃度の平均値より算出した。

4.3 分解度

28日後の分解度は下記のとおりであった。

| | | (汚泥 + 被験物質) 系 | | | | 平均 |
|----------------|---|---------------|-----|-----|-----------------------|----|
| | | [2] | [3] | [4] | | |
| BOD 分解度 | % | -10 | -6 | -5 | 0 (-7) ^{*1} | |
| DOC 分解度 | % | -10 | -11 | -9 | 0 (-10) ^{*1} | |
| 被験物質分解度 (HPLC) | % | -3 | -7 | -3 | 0 (-4) ^{*1} | |

*1 分解度の平均値が負の値に算出されたため、平均値を 0 としカッコ内にその計算値を示した。

4.4 考 察

被験物質の定量分析の結果、被験物質残留率は(水+被験物質)系で91%、(汚泥+被験物質)系で93%、97%及び94%となり、若干の収支不足が認められた。HPLCクロマトグラム上に変化ピークが認められなかったこと及びBOD分解度の平均値が0%であったことから、分解や変化以外の要因で収支不足が生じたと考えられた。予備試験において、一部の被験物質が試験容器内に装着する炭酸ガス吸収剤(ソーダライム)へ移行することが確認されていたため、ソーダライム分析を行った結果、3~5%の被験物質が検出され、被験物質残留率と合算した物質収支は94~100%となった(5.1参照)。

上記の結果より、少量の被験物質が揮発によりソーダライムへ移行したため、被験物質の定量分析において若干の収支不足が生じたと考えられる。また、DOC分解度が-9~-11%と大きく負の値となったが、(汚泥+被験物質)系よりも(水+被験物質)系の方がソーダライムに移行した被験物質の量が若干多かったこと、並びにDOC理論量が8.8 mgCと低いために分析誤差の影響を受けたことが要因であると考えられる。

以上より、少量の被験物質はソーダライムに移行したが、被験物質は微生物により分解されなかったと考えられる。

4.5 結 論

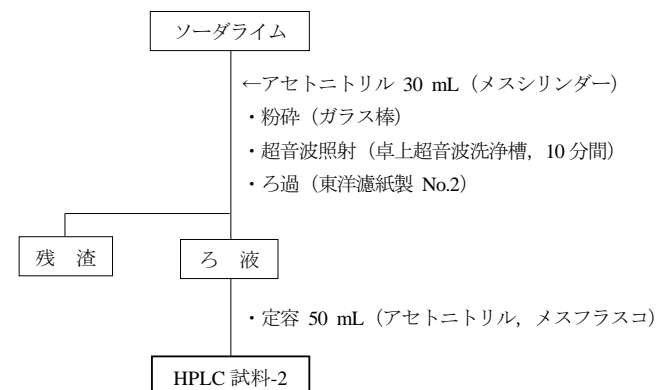
本試験条件下において、被験物質は微生物により分解されなかった。

5. 備 考

5.1 炭酸ガス吸収剤(ソーダライム)中の被験物質分析

試験液における被験物質残留率が低い値となった原因を調査するために、ソーダライムについて前処理操作を行い分析に供した。

(1) 分析試料の調製



(2) 被験物質の定量分析

(1)で前処理を行って得られた HPLC 試料-2 について、1.5.2(2)に示す定量条件に従って被験物質を分析した。

(3) 分析結果

分析結果は下記のとおりであった。

| | (水+被験物質)系 | (汚泥+被験物質)系 | | | | 理論量 | Reference |
|--------------------------------------|-----------|------------|-----|-----|-----|------|-----------|
| | | [1] | [2] | [3] | [4] | | |
| 被験物質検出量及び検出率 ^{*4} (HPLC) | mg | 1.0 | 0.8 | 0.9 | 1.4 | 30.0 | 1, 2 |
| | % | 3 | 3 | 3 | 5 | - | |
| 物質収支 (被験物質残留率 ^{*5+①}) | % | 94 | 96 | 100 | 99 | - | - |

*4 試験液からソーダライムへの移行を厳密に再現できないため、ソーダライムからの回収試験は実施しなかった。従って、回収率による補正は行わなかった。

*5 4.2 試験液の分析結果の被験物質残留率

2,6-ジブromo-4-メチルフェノールの1-オクタノールと水との間の分配係数試験 (HPLC 法)

要 約

試 験 法

本試験は以下の試験法に従って行った。

- 「新規化学物質等に係る試験の方法について」(平成15年11月21日、薬食発第1121002号、平成15・11・13製局第2号、環保企発第031121002号、平成18年11月20日最終改正)に規定する〈1-オクタノールと水との間の分配係数測定試験〉
- "OECD Guidelines for the Testing of Chemicals"に定める"Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method (Guideline 117, April 13, 2004)"

GLP 基準

本試験は以下の基準を適用した。

- 「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準について」(平成15年11月21日、薬食発第1121003号、平成15・11・17製局第3号、環保企発第031121004号、平成20年7月4日最終改正)に規定する「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準」
- "OECD Principles of Good Laboratory Practice" (November 26, 1997)

試 験 条 件

- 試 験 装 置 高速液体クロマトグラフ
溶離液：メタノール/りん酸緩衝液 (pH5.0) [10 mmol/L りん酸二水素カリウム溶液を 1 mol/L 水酸化ナトリウム溶液で pH5.0 に調整] (75/25 v/v)
- 試 験 温 度 25±1°C

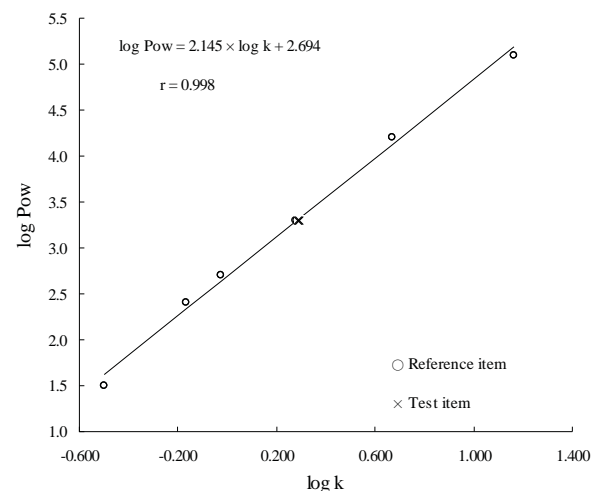
試験結果

(1) 測定結果

| 測定物質名称 | | t _R | k | log k | log Pow |
|--------|-----------------------------------|----------------|-------------------------------|--------|---------|
| 標 | チオ尿素 (デッドタイム測定用: t ₀) | 1.73 | Average t ₀ = 1.73 | | |
| | | 1.72 | | | |
| 準 | フェノール | 2.27 | 0.316 | -0.500 | 1.5 |
| | | 2.27 | 0.316 | -0.500 | 1.5 |
| 物 | 4-クロロフェノール | 2.90 | 0.681 | -0.167 | 2.4 |
| | | 2.90 | 0.681 | -0.167 | 2.4 |
| 質 | 1-ナフトール | 3.35 | 0.942 | -0.026 | 2.7 |
| | | 3.35 | 0.942 | -0.026 | 2.7 |
| 質 | チモール | 5.02 | 1.910 | 0.281 | 3.3 |
| | | 5.00 | 1.899 | 0.278 | 3.3 |
| 質 | ジフェニルエーテル | 9.77 | 4.664 | 0.669 | 4.2 |
| | | 9.77 | 4.664 | 0.669 | 4.2 |
| 被験物質 | 2,6-ジプロモ-4-メチルフェノール | 26.72 | 14.490 | 1.161 | 5.1 |
| | | 26.73 | 14.496 | 1.161 | 5.1 |
| 被験物質 | 2,6-ジプロモ-4-メチルフェノール | 5.10 | 1.957 | 0.291 | 3.3 |
| | | 5.08 | 1.945 | 0.289 | 3.3 |

t₀ : Dead time (デッドタイム) (min)t_R : Retention time (保持時間) (min)k (保持係数) = (t_R - t₀) / t₀

(2) 相関図及び回歸式 (相関係数を含む)



(3) 被験物質の分配係数

| log Pow | | |
|---------|-----|-----|
| 測定値 | | 平均値 |
| 3.3 | 3.3 | 3.3 |

1. 試験の実施

被験物質は解離性物質 [pKa=7.20] であることから、非解離型 (遊離酸) として測定するために、解離定数より小さい pH5.0 の緩衝液を含む溶離液を用いて試験を行った。

1.1 測定条件

(1) 試験装置

| | |
|-------------|--|
| 機 器 | 高速液体クロマトグラフ |
| ポ ン プ | 島津製作所製 LC-20AD _{sp} |
| 紫外可視分光検出器 | 島津製作所製 SPD-20AV |
| カラムオープン | 島津製作所製 CTO-20AC |
| オートサンブラ | 島津製作所製 SIL-20AC |
| システムコントローラー | 島津製作所製 CBM-20A |
| デガッサー | 島津製作所製 DGU-20A _s |
| カ ラ ム | L-column ODS (15 cm × 4.6 mm I.D., 化学物質評価研究機構製) |
| カ ラ ム 温 度 | 25°C |
| 溶 離 液 | メタノール/りん酸緩衝液 (pH5.0) [10 mmol/L りん酸二水素カリウム溶液を 1 mol/L 水酸化ナトリウム溶液で pH5.0 に調整] (75/25 v/v) |
| 流 量 | 1 mL/min |
| 測 定 波 長 | 標準物質 210 nm 被験物質 210 nm |
| 注 入 量 | 10 μL |
| 検 出 器 出 力 | 1 V/AU |

(2) 試験温度

25 ± 1°C

1.2 試験操作

(1) 標準物質溶液の調製

標準物質としてフェノール、4-クロロフェノール、1-ナフトール、チモール、ジフェニルエーテル及びフルオランテンを使用した。デッドタイムの測定用物質としてチオ尿素を使用した。これら 6 種の標準物質及びチオ尿素それぞれ約 20 mg を電子分析天びんではかりとり、メタノールに溶解してそれぞれ約 2000 mg/L の溶液を調製した。これらの溶液を混合し、溶離液で希釈して分配係数測定のための標準物質溶液を調製した。各標準物質濃度は次頁のとおりとした。

| 標準物質 | | | 濃度 (mg/L) |
|------------|--------|-----------|--------------|
| 名称 | 純度 (%) | log Pow 値 | |
| チオ尿素 | 98.0以上 | デッドタイム測定用 | 約 10 |
| フェノール | 99.0以上 | 1.5 | 約 10 |
| 4-クロロフェノール | >98.0 | 2.4 | 約 20 |
| 1-ナフトール | 99.0以上 | 2.7 | 約 5 |
| チモール | 98.0以上 | 3.3 | 約 20 |
| ジフェニルエーテル | 99.0以上 | 4.2 | 約 20 |
| フルオランテン | >98 | 5.1 | 約 20 |

(2) 被験物質溶液の調製

供試試料約 100 mg を電子分析天びんではかりとり、メタノールに溶解して約 1000 mg/L の被験物質原液を調製した。これを溶離液で希釈して約 10 mg/L の被験物質溶液とした。

(3) 標準物質の測定及び回帰直線の作成

調製した標準物質溶液を 1.1(1)の試験装置に注入し、標準物質ピークの保持時間を 2 回測定した。保持時間から、標準物質の保持係数 (k) を以下の式に従って算出した。次に標準物質の分配係数及び保持係数の対数値から、最小二乗法により回帰直線を作成した。

$$k = \frac{t_R - t_0}{t_0}$$

t_R : 標準物質の保持時間 (分)

t_0 : デッドタイム (分) (2回の平均値)

$$\log \text{Pow} = a \times \log k + b$$

a : 直線回帰式の傾き

b : 直線回帰式の切片

(4) 被験物質の測定

調製した被験物質溶液を 1.1(1)の試験装置に注入し、被験物質ピークの保持時間を 2 回測定した。また、溶媒ブランク液を 1 回測定し、被験物質ピーク位置にピークがないことを確認した。

1.3 分配係数の算出

被験物質ピークの保持時間から保持係数を求め、作成した直線回帰式を用いて被験物質の分配係数を算出した。算出した分配係数の平均値を被験物質の分配係数とした。分配係数は対数表示とした。

1.4 数値の取扱い

数値の丸め方は JIS Z 8401 : 1999 規則 B の方法に従い、小数点以下 1 ケタで表示した。

2. 試験成績の信頼性に影響を及ぼしたと思われる環境要因

当該要因はなかった。

3. 試験結果

3.1 測定結果

| | | 測定物質名称 | t_R | k | log k | log Pow |
|------|--------------------------|--------|-------|----------------------|--------|---------|
| 標準物質 | チオ尿素 (デッドタイム測定用: t_0) | | 1.73 | Average $t_0 = 1.73$ | | |
| | | | 1.72 | | | |
| | フェノール | | 2.27 | 0.316 | -0.500 | 1.5 |
| | | | 2.27 | 0.316 | -0.500 | 1.5 |
| | 4-クロロフェノール | | 2.90 | 0.681 | -0.167 | 2.4 |
| | | | 2.90 | 0.681 | -0.167 | 2.4 |
| | 1-ナフトール | | 3.35 | 0.942 | -0.026 | 2.7 |
| | | | 3.35 | 0.942 | -0.026 | 2.7 |
| | チモール | | 5.02 | 1.910 | 0.281 | 3.3 |
| | | | 5.00 | 1.899 | 0.278 | 3.3 |
| | ジフェニルエーテル | | 9.77 | 4.664 | 0.669 | 4.2 |
| | | | 9.77 | 4.664 | 0.669 | 4.2 |
| | フルオランテン | | 26.72 | 14.490 | 1.161 | 5.1 |
| | | | 26.73 | 14.496 | 1.161 | 5.1 |
| 被験物質 | 2,6-ジプロモ-4-メチルフェノール | | 5.10 | 1.957 | 0.291 | 3.3 |
| | | | 5.08 | 1.945 | 0.289 | 3.3 |

t_0 : Dead time (デッドタイム) (min)

t_R : Retention time (保持時間) (min)

k (保持係数) = $(t_R - t_0) / t_0$

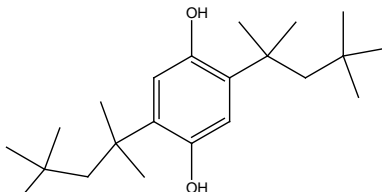
3.2 測定条件における回帰直線の回帰式

$$\log \text{Pow} = 2.145 \times \log k + 2.694$$

3.3 被験物質の分配係数

| log Pow | | |
|---------|-----|-----|
| 測定値 | | 平均値 |
| 3.3 | 3.3 | 3.3 |

分配係数計算ソフト [ClogP v4.0 (BioByte Corp.)及び Kowwin v1.67 (U.S. Environmental Protection Agency)] による予備推定値は、それぞれ log Pow=3.53 及び 3.84 であった。

| 整理番号 K-1850 (3-553) | | 分解度試験 | | 分解度試験 | | 分解度試験 | |
|--|--|---------------------------|--|----------------------------|--|---------------------|--|
| 2, 5-ビス(1, 1, 3, 3-テトラメチルブタン-1-イル)ヒド | | 事業対象年度 平成21年度 | | 契約 年 月 日 | | 契約 年 月 日 | |
| ロキノン (903-19-5) | | 試験期間 21.12.16~22.2.23 | | 試験期間 . . ~ . . | | 試験期間 . . ~ . . | |
| | | 試験装置 (標)・揮 | | 試験装置 標・揮 | | 試験装置 標・揮 | |
| 構造式(示性式)・物理化学的性状  分子式 C ₂₂ H ₃₈ O ₂ 分子量 334.54 | | 試験濃度 | | 試験濃度 | | 試験濃度 | |
| | | 有機物質 100 mg/L | | 被験物質 mg/L | | 被験物質 mg/L | |
| | | 汚泥 30 mg/L | | 汚泥 mg/L | | 汚泥 mg/L | |
| | | 本試験期間 4 週間 | | 本試験期間 週間 | | 本試験期間 週間 | |
| | | 間接 | | BOD 0, 0, -2 (0)% | | 間接 | |
| 純度*1 97.0% | | 外観 うすい褐色の結晶性粉末 | | 試験結果 間接 | | 試験結果 間接 | |
| 不純物(物質名, 含有率) 不明 | | 溶解度(対水, その他) 対水 0.027mg/L | | 試験結果 直接 | | 試験結果 直接 | |
| | | 審査部会 第101回 22年12月17日開催 | | 審査部会 第 回 年 月 日開催 | | 審査部会 第 回 年 月 日開催 | |
| | | 判定 | | 判定 | | 判定 | |
| 融点 129.1℃ | | 1-オクタノール/水分係数 | | 備考 | | 備考 | |
| 比重 - | | - | | 1. 実施機関 ・三菱化学メディエンス株式会社 | | | |
| LD50 - | | 安定性 | | | | | |
| IRチャートの有無 有・(無) | | - | | | | | |
| 用途*2 写真・印刷等用、ゴム添加剤 | | | | | | | |
| 生産量*2 (18年) 製造及び輸入 100~1,000 t 未満 | | | | | | | |
| 試料 提供試料 | | | | | | | |
| 経済産業公報発表年月日 | | 年 月 日 | | | | | |

*1 GCによる。 *2 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査による。