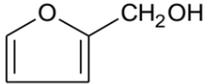


平成29年度デフォルト適用候補物質

(1) 平成29年度デフォルト適用を検討する物質 (8物質)

番号	CAS番号	名称	構造	平成29年度暴露クラス(生態)		デフォルト適用検討の理由		参考: QSAR予測結果			
				難分解性 または 分解性不明	良分解性	有害性情 報なし	情報の信 頼性なし	ECOSAR <sup>*1</sup>		KATE <sup>*2</sup>	
								甲殻類急性 (mg/L)	魚類急性 (mg/L)	甲殻類急性 (mg/L)	魚類急性 (mg/L)
1	26635-75-6	Poly(oxy-1,2-ethanediyl), .alpha.-[2-[(1-oxododecyl)amino]ethyl]- .omega.-hydroxy-	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_{10}-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{NH}-\text{CH}_2\text{CH}_2-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{OH}$	3	4	○		12.3	17.5	8.6	21
2	33939-64-9	ナトリウム=α-(カルボキシラトメチル)-ω-(ドデカン-1-イルオキシ)ポリ(オキシエチレン)	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_{11}-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{O}-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{O}^- \text{Na}^+$	3	4	○		判定不能	判定不能	構造×	構造×
3	98-00-0	フルフリルアルコール		4	4		○ <sup>*3</sup>	489	697	構造×	440
4	3164-85-0	カリウム=2-エチルヘキサノアート	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{O}^- \text{K}^+$ $\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_3-\text{CH}-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{O}^- \text{K}^+$	4	4		○ <sup>*3</sup>	判定不能	判定不能	41	45
5	68920-66-1	Alcohols, C16-18 and C18-unsatd., ethoxylated	$\text{R}-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{OH}$ R:炭素数16~18の飽和又は不飽和アルキル	4	4		○ <sup>*3</sup>	logP×	logP×	3.4 (水溶解度超のため使用不可)	2.1 (水溶解度超のため使用不可)
6	68439-49-6	Alcohols, C16-18, ethoxylated	$\text{C}_m\text{H}_{2m+1}-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{OH}$ m=16~18	3	4		○ <sup>*3</sup>	QSAR予測せず	QSAR予測せず	QSAR予測せず	QSAR予測せず
7	9005-00-9	Poly(oxy-1,2-ethanediyl), .alpha.-octadecyl-.omega.-hydroxy-	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_{17}-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{OH}$	4	5		○ <sup>*3</sup>	QSAR予測せず	QSAR予測せず	QSAR予測せず	QSAR予測せず
8	78-23-9	3-ヒドロキシ-2, 2-ビス(ヒドロキシメチル)プロピル=ステアラート	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_{16}-\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}-\text{O}-\text{CH}_2-\underset{\text{CH}_2\text{OH}}{\overset{\text{CH}_2\text{OH}}{\text{C}}}-\text{CH}_2\text{OH}$	3	3	○		logP×	logP×	logP×	logP×

\*1 ECOSAR v1.11により算出。魚類エンドポイント: Fish 96h LC50、甲殻類エンドポイント: Daphnid 48h LC50、logPはKowWin v1.68を使用。

\*2 KATE on NET により算出。魚類エンドポイント: Fish 96h LC50、甲殻類エンドポイント: Daphnid 48h EC50、logPはKowWin v1.68を使用。

\*3 . . . 別添参照



CAS番号  
 化審法整理番号  
 旧指定物質番号  
 物質名

3164-85-0

カリウム=2-エチルヘキサノアート

水溶解度  
 備考

2.86E+05 mg/L (25°C, 推計値)

生物種	信頼性	学名	影響内容	エンドポイント	暴露期間(値)	暴露期間(単位)	毒性値(不等号)	毒性値(数値)	毒性値(単位)	原著				詳細な信頼性評価を必要としない有害性データ 【上段】評価書・データベース略称 【下段】信頼性評価基準(化審法ランク:評価書ランク)											詳細な信頼性評価を必要とする有害性データ	備考 (不採用の理由)	文献情報		
										著者	タイトル	記載誌	発行年	化審法審査済	農薬登録基準	USEPA PED	OECD SIDS	EU IUCLID	ECHA	環境省環境リスク初期評価	EU RAR	NITE初期リスク(有害性)評価	ECETOC	EHC				CICAD	Japan C
														全て1	1:分散剤規定以下及び水溶解度以下	1:Cかつ化審法同等試験 2:S	1:1かつ化審法同等試験 2:1又は2	2:1or2	2:1or2	1:Aかつ生態影響試験 2:A又はB	2:valid	2:採用されたデータ	2:採用されたデータ	2:採用されたデータ				2:採用されたデータ	1:GLP 2:非GLP
藻類	急性	4	Desmodesmus subspicatus	growth rate	EC50	72	hours	49.3	mg/L		study report		1988														化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	②藻類 key study read-across from supporting substance	
		4	Pseudokirchnerella subcapitata	growth rate	EC50	72	hours	500	mg/L	NITE (National Institute of Technology and Evaluation) Japan	Information on Environmental Toxicity		2001														化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 19766-89-3 Sodium 2-ethylhexanoate	①藻類 supporting study read-across from supporting substance	
	慢性	4	Desmodesmus subspicatus	growth rate	EC10	72	hours	32	mg/L		study report		1988														化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	②藻類 key study read-across from supporting substance	
		4	Pseudokirchnerella subcapitata	growth rate	NOEC	72	hours	130	mg/L	NITE (National Institute of Technology and Evaluation) Japan	Information on Environmental Toxicity		2001														化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 19766-89-3 Sodium 2-ethylhexanoate	①藻類 supporting study read-across from supporting substance	

CAS番号 3164-85-0  
 化審法整理番号  
 旧指定物質番号  
 物質名 カリウム=2-エチルヘキサノアート  
 水溶解度 2.86E+05 mg/L (25°C, 推計値)  
 備考

生物種	信頼性	学名	影響内容	エンドポイント	暴露期間(値)	暴露期間(単位)	毒性値(不等号)	毒性値(数値)	毒性値(単位)	原著				詳細な信頼性評価を必要としない有害性データ 【上段】評価書・データベース略称 【下段】信頼性評価基準(化審法ランク:評価書ランク)											詳細な信頼性評価を必要とする有害性データ	備考 (不採用の理由)	文献情報		
										著者	タイトル	記載誌	発行年	化審法審査済	農薬登録基準	USEPA PED	OECD SIDS	EU IUCLID	ECHA	環境省環境リスク初期評価	EU RAR	NITE初期リスク(有害性)評価	ECETOC	EHC				CICAD	Japan C
														全て1	1:分散剤規定以下及び水溶解度以下	1:Cかつ化審法同等試験 2:S	1:1かつ化審法同等試験 2:1又は2	2:1or2	2:1or2	1:Aかつ生態影響試験 2:A又はB	2:valid	2:採用されたデータ	2:採用されたデータ	2:採用されたデータ				2:採用されたデータ	1:GLP 2:非GLP
甲殻類	急性	4	Daphnia magna		LC50	48	hours	85.38	mg/L		publication															化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	⑪甲殻類 weight of evidence read-across from supporting substance		
		4	Daphnia magna		LC50	48	hours	85.4	mg/L		study report															化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	③甲殻類 weight of evidence read-across from supporting substance		
		4	Daphnia magna	mobility	EC50	48	hours	106	mg/L		study report																化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	⑤甲殻類 weight of evidence read-across from supporting substance	
		4	Daphnia magna	mobility	EC50	48	hours	116.6	mg/L	Horn O, Nalli S, Cooper D, Nicell J.	Plasticizer metabolites in the environment	Water Res 38(17):3693-3698.	2004														化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	⑩甲殻類 weight of evidence read-across from supporting substance	
		4	Daphnia magna		LC50	48	hours	120	mg/L	Horn O, Nalli S, Cooper D, Nicell J.	Plasticizer metabolites in the environment	Water Res 38(17):3693-3698.	2004														化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	⑩甲殻類 weight of evidence read-across from supporting substance	
		4	Daphnia magna	mobility	EC50	48	hours	910	mg/L	NITE (National Institute of Technology and Evaluation) Japan	Information on Environmental Toxicity		2001														化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 19766-89-3 Sodium 2-ethylhexanoate	④甲殻類 weight of evidence read-across from supporting substance	
	慢性	4	Daphnia magna	reproduction	NOEC	21	days	18	mg/L	NITE Japan	Daphnia magna - Reproduction	Chemical Risk Information Platform (CHRIP), National Institute of Technology and Evaluation Japan														化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 19766-89-3 Sodium 2-ethylhexanoate	⑥甲殻類慢性 supporting study read-across from supporting substance		
	4	Daphnia magna	reproduction	NOEC	21	days	25	mg/L	BASF	Material safety data sheet: 2ethylhexanoic acid	[Internet]. Mississauga (ON): BASF The Chemical Company. [revised 2009 Apr 24; cited 2010 May].	2009													被験物質不明、read-acrossのため	⑦甲殻類慢性 key study read-across from supporting substance			

CAS番号 3164-85-0  
 化審法整理番号  
 旧指定物質番号  
 物質名 カリウム=2-エチルヘキサノアート  
 水溶解度 2.86E+05 mg/L (25°C, 推計値)  
 備考

生物種	信頼性	学名	影響内容	エンドポイント	暴露期間(値)	暴露期間(単位)	毒性値(不等号)	毒性値(数値)	毒性値(単位)	原著				詳細な信頼性評価を必要としない有害性データ 【上段】評価書・データベース略称 【下段】信頼性評価基準(化審法ランク:評価書ランク)											備考 (不採用の理由)	文献情報			
										著者	タイトル	記載誌	発行年	化審法 審査済	農薬登 録基準	USEPA PED	OECD SIDS	EU IUCLID	ECHA	環境省 環境リ スク初 期評価	EU RAR	NITE初 期リス ク(有 害性) 評価	ECETO C	EHC			CICAD	Japan C	詳細な 信頼性 評価 を必要 とする 有害 性デー タ
														全て1	1:分散 剤規定 以下及 び水溶 解度以 下	1:Cかつ 化審法 同等試 験 2:S	1:1かつ 化審法 同等試 験 2:1又は 2	2:1or2	2:1or2	1:Aかつ 生態影 響試験 2:A又は B	2:valid	2:採用さ れた データ	2:採用さ れた データ	2:採用さ れた データ			2:採用さ れた データ	1:GLP 2:非 GLP	データ名 称
魚類	急性	4	Pimephales promelas	LC50	96	hours		70	mg/L		publication															化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	⑩魚類 weight of evidence read-across from supporting substance		
		4	Oryzias latipes	LC50	96	hours	>	100	mg/L	NITE (National Institute of Technology and Evaluation) Japan	Information on Environmental Toxicity															化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 19766-89-3 Sodium 2-ethylhexanoate	⑧魚類 key study read-across from supporting substance		
		4	Oncorhynchus mykiss	LC50	96	hours		150	mg/L	Horn O, Nalli S, Cooper D, Nicell J	Plasticizer metabolites in the environment.	Water Res														化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	⑬魚類 weight of evidence read-across from supporting substance		
		4	Oncorhynchus mykiss	LC50	96	hours		180	mg/L		study report															化審法ではナトリウム塩からカリウム塩の毒性値を判断するには同等性を判断するが、そのためのデータが不足しているため、採用不可 149-57-5 2-ethylhexanoic acid	⑨魚類 supporting study read-across from supporting substance		
魚類	慢性																												

\* 備考として特に記載ない場合、被験物質は当該物質と同一





有害性クラス判定の根拠データ一覧

CAS番号 9005-00-9  
 化審法整理番号  
 旧指定物質番号  
 物質名 Poly(oxy-1,2-ethanediyl), .alpha.-octadecyl-.omega.-hydroxy-  
 水溶解度 mg/L  
 備考

生物種	信頼性	学名	影響内容	エンドポイント	暴露期間(値)	暴露期間(単位)	毒性値(不等号)	毒性値(数値)	毒性値(単位)	原著		詳細な信頼性評価を必要としない有害性データ 【上段】評価書・データベース略称 【下段】信頼性評価基準(化審法ランク:評価書ランク)												詳細な信頼性評価を必要とする有害性データ	備考 (不採用の理由等)	文献情報			
										著者	タイトル	記載誌	発行年	化審法審査済	農薬登録基準	USEPA PED	OECD SIDS	EU IUCLID	ECHA	環境省環境リスク初期評価	EU RAR	NITE初期リスク(有害性)評価	ECETOC				EHC	CICAD	Japan C
														全て1	1:分散剤規定以下及び水溶解度以下	1:Cかつ化審法同等試験 2:S	1:1かつ化審法同等試験 2:1又は2	2:1or2	2:1or2	1:Aかつ生態影響試験 2:A又はB	2:valid	2:採用されたデータ	2:採用されたデータ				2:採用されたデータ	2:採用されたデータ	1:GLP 2:非GLP
藻類	急性																												
	慢性																												
甲殻類	急性																												
	慢性																												
魚類	急性	4	Oncorhynchus mykiss	LC50	96	hour	>	5.6	mg/L	study report																ECHAで信頼性「4」のため	① Exp Supporting Short-term toxicity to fish.001		
	慢性																												

\* 備考として特に記載ない場合、被験物質は当該物質と同一