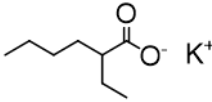


優先評価化学物質の分解性の評価

| | |
|----------|---|
| 評価結果 | 良分解性 |
| 優先評価化学物質 | 通し番号：230 官報公示名称：カリウム＝2－エチルヘキサノアート 官報公示整理番号：2-611 |
| 評価対象物質 | 物質名称：カリウム＝2－エチルヘキサノアート CAS RN®：3164-85-0 分子量：182.3 分子式：C ₈ H ₁₅ KO ₂ 構造式：  |
| 分解性評価 | <p>評価対象物質の分解性</p> <p>評価対象物質の分解度試験情報は入手できなかったため、類推により評価した。</p> <p>鉛＝ビス（2－エチルヘキサノアート）（類似物質1）は水中で速やかに変化し、2－エチルヘキサノ酸及び不溶性鉛が生成した。2－エチルヘキサノ酸は微生物により分解され、不溶性鉛は試験液中に残留した。</p> <p>評価対象物質の解離により生成すると考えられる2－エチルヘキサノ酸（類似物質2）は、類似物質1からの類推により、良分解性判定がなされている。</p> <p>エチル＝2－エチルヘキサノアート（類似物質3）はエステルが加水分解し、2－エチルヘキサノ酸とエタノール（良分解性判定済み）が生成すると考えられ、同様に、イソプロピル＝2－エチルヘキサノアート（類似物質4）は、2－エチルヘキサノ酸とプロパン－2－オール（良分解性判定済み）を生成すると考えられるが、分解度試験での分解度はそれぞれ67%、74.6%となっており、2－エチルヘキサノ酸も分解したと考えられる。</p> <p>以上より、評価対象物質は易分解試験条件下で分解すると考えられる。</p> <p>評価の不確実性：低い（カチオンの異なる塩及び同様の分解経路が考えられる物質からの類推結果等に基づく）</p> <p>残留変化物の有無及び残留変化物がある場合のその構造</p> <p>類似物質の分解度試験結果より、2－エチルヘキサノ酸は無機化し、カリウムイオンが残留すると考えられる。</p> <p>なお、環境中で既知見通知で示されたイオンのみで分解する化学物質については、「製造数量等の届出を要しない一般化学物質の選定の考え方について」（平成22年4月23日）においてリスク評価を行う必要性が基本的には認められないと考えられるとされている。そのため、カリウムイオンのリスク評価を行う必要性はないと考えられる。</p> <p>評価の不確実性：低い（カチオンの異なる塩及び同様の分解経路が考えられる物質からの類推結果等に基づく）</p> |

※化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議（令和6年度）において了承された評価結果

評価に用いた主な情報（類似物質・実測試験結果）

| 物質 | 類似物質 1 | 類似物質 2 | | | | 類似物質 3 | 類似物質 4 |
|----------------|---|--------------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| 化学物質名 | 鉛=ビス（2-エチルヘキサノア-ト） | 2-エチルヘキサン酸 | | | | エチル=2-エチルヘキサノア-ト | イソプロピル=2-エチルヘキサノア-ト |
| 構造式 | | | | | | | |
| 化審法分解性判定 | 難分解性（分解性試験結果） | 良分解性（類似物質 1 から類推） ² | | | | - | - |
| 結果番号 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 情報源 | 化審法既存点検 ¹ | REACH 登録情報 ³ | REACH 登録情報 ³ | REACH 登録情報 ³ | REACH 登録情報 ³ | REACH 登録情報 ⁴ | REACH 登録情報 ⁵ |
| 試験法名 | OECD TG301C | OECD TG301E | EU Method C.5 | OECD TG302B | - | OECD TG301D | OECD TG310 |
| GLP 適合 | OECD GLP | 非 GLP | 非 GLP | 非 GLP | 非 GLP | OECD GLP | OECD GLP |
| 被験物質濃度 | 100 mg/L | 20 mg/L | 512 mg/L | 1288 mg/L | ca. 2,310 mg/L | 2 mg/L 5 mg/L | 17.2 mg/L |
| 植種源 | 標準活性汚泥 | 都市下水処理場から得た下水 | - | 工場排水処理場から得た活性汚泥 | 河川堆積物 | 都市下水処理場から得た活性汚泥 | 都市下水処理場から得た活性汚泥 |
| 植種濃度 | 30 mg/L | 0.5 mL/L | - | - | - | - | - |
| 試験期間[日] | 28 | 28 | 20 | 6 | 15 | 28 | 28 |
| 分解度[%] /半減期 | BOD: 99 | DOC removal: 99 | Bio-oxidation: 83 | TOC removal: > 85 | 半減期: < 180 h | O2 consumption: 67 | CO2 evolution: 74.6 |
| 信頼性 | 1A | 1B | 1B | 1B | 2A | 1A | 1A |
| 関連性 | High | High | N.A. | N.A. | Mid | High | High |
| 妥当性 | High | High | N.A. | N.A. | Mid | High | High |
| 備考 | 被験物質は水中で速やかに変化し、2-エチルヘキサン酸及び不溶性鉛（水にも有機溶媒にも溶解しない無機の鉛）が生成した。2-エチルヘキサン酸は微生物により分解され、不溶性鉛は試験液中に残留した。 | - | | | | - | - |

※N.A.は Not appropriate の略。

収集情報の評価結果

| 分類 | 収集された個別情報 | | | | | 個別情報の品質評価 | | | 情報の統合 | | | 分類毎の情報の統合 | | | 全ての情報の統合 | | | | | | | | | |
|--|--------------------------|---|-------------------|-----------------------------|---|------------|------------|------------|------------|------------|--|-----------------|------------|---|----------------------|------------|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 情報の種類 | 情報源の詳細 (実験データの情報源、 QSARモデル名等) | 結果 番号 | 結果の要約 (試験法・GLP・ 分解度等) | 備考 (変化物等) | 信頼性ラ ンク | 関連性ラ ンク | 妥当性ラ ンク | 情報の 一貫性 | 証拠の 強さ | 不確実性 | 情報の 一貫性 | 証拠の 強さ | 不確実性 | 情報の 一貫性 | 証拠の 強さ | 不確実性 | | | | | | | |
| 易分解性 | 実測 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | | | | | | | |
| | 類推 | 類似物質1~4に基づく類推 | 1~7 ※別紙2 参照 | 易分解性 | - | 2B | High | High | - | 中程度- 強い | 低い (カチオンの異なる塩 及び同様の分解経路 が考えられる物質から の類推。) | あり (類推、QSAR) | 中程度- 強い | 低い (カチオンの異なる塩 及び同様の分解経路 が考えられる物質から の類推結果等に基づ く。) | あり (易分解性、その 他) | 中程度- 強い | 低い (カチオンの異なる塩 及び同様の分解経路 が考えられる物質から の類推結果等に基づ く。) | | | | | | | |
| | QSAR* (分解度) | CATALOGIC 301C v.11.15 | - | BOD: 77% 親物質残留率: 0% | Kイオンが全量、2-エチルヘキサ ン酸が3.9%残留するほか、1%以 上生成する変化物は無いと予測さ れている。 | - | - | N.A. | あり | 弱い- 中程度 | 中程度 (適応領域外となっ ているモデルがある。) | | | | | | | | | | | | | |
| | | CATALOGIC Kinetic 301F v.13.16 | - | BOD: 73% 親物質残留率: 0% | Kイオンが全量残留するほか、1% 以上生成する変化物は無いと予 測されている。 | - | - | N.A. | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | CATALOGIC Kinetic 301B v.02.09 | - | CO2: 85% 親物質残留率: 0% | Kイオンが全量残留するほか、1% 以上生成する変化物は無いと予 測されている。 | - | - | Low | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | QSAR* (定性) | Danish QSAR v.1 | - | 易分解性 | - | - | - | Low | あり | 弱い- 中程度 | 中程度 (適応領域外となっ ているモデルがある。) | | | | | | | | | | | | | |
| | | BIOWIN5 v.4.10 | - | 易分解性 | - | - | - | Mid | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | BIOWIN6 v.4.10 | - | 易分解性 | - | - | - | Mid | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | VEGA Ready Biodegradation model v.1.0.10 | - | 易分解性 | - | - | - | N.A. | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | 本質的 分解性 | 実測 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | | | | | | | - | - | - | - | - | - | - |
| 類推 | | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | | | | | | | - | - | - | - | - | - | - |
| QSAR | | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | | | | | | |
| シミュレ ーション | 実測 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | | | | | | |
| | 類推 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | | | | | | |
| | QSAR* (半減期) | VEGA Persistence (sediment) quantitative model v.1.0.1 | - | 予測不可 | - | - | - | - | あり | 中程度 | 高い (究極分解予測は BIOWIN3の1モデル のみ。) | | | | | | | | | | | | | |
| | | VEGA Persistence (soil) quantitative model v.1.0.1 | - | 11 days | - | - | N.A. | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| VEGA Persistence (water) quantitative model v.1.0.1 | | - | 予測不可 | - | - | - | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| その他 | 実測 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | あり | 中程度 | 高い (究極分解予測は BIOWIN3の1モデル のみ。) | あり | 中程度 | 低い (カチオンの異なる塩 及び同様の分解経路 が考えられる物質から の類推結果等に基づ く。) | | | | | | | |
| | 類推 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | | | | | | | | | | | | | | |
| | QSAR* (生分解速度 /半減期) | BIOWIN3 v.4.10 | - | Days-Weeks (易分解性) | - | - | - | Mid | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | BIOWIN4 v.4.10 | - | Hours-Days (易分解性) | - | - | - | Mid | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | BioHCwin v.1.01a | - | 予測不可 (対象外) | - | - | - | - | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | QSAR* (非生物的分解性) | CATALOGIC Abiotic 301C v.01.07 | - | 親物質残留率: 0% | 99.9%が2-エチルヘキサ ン酸と なって残留すると予測されている。 | - | - | N.A. | | | | | | | | | | | | | | | | |
| QSAR* (嫌氣的生分解性) | BIOWIN7 v.4.10 | - | 難分解性 | - | - | - | N.A. | | | | | | | | | | | | | | | | | |

評価に用いていないデータは灰色 ()。サポート情報は薄青色 ()。N.A.はNot Appropriateの略。

* 妥当性ランクについては、類似物質の結果も踏まえて評価。

類推に用いた類似物質情報の評価結果

| 分類 | 収集された個別情報 | | | | | | | | 個別情報の品質評価 | | | 類推結果 | |
|------|-----------|--------------------|-----|--------------------------------------|----------------------------------|----------|---|--|--------------------------|------------|------------|---|------|
| | 物質 | 化学物質名 | 構造式 | 化審法 分解性判定 | 情報源の詳細 (実測の情報源、 QSARモデル名等) | 結果 番号 | 結果の要約 (試験法・GLP・分解度等) | 備考 (変化物等) | 信頼性ラ ンク | 関連性ラ ンク | 妥当性ラ ンク | | |
| 易分解性 | 類似物質1 | 鉛=ビス(2-エチルヘキサノート) | | 難分解性 (分解性試験 結果) | 化審法 既存点検 ¹ | 1 | (OECD TG301C, OECD GLP, 28日) BOD: 99% | 2-エチルヘキサノ酸は微生物により分解され、不溶性鉛は試験液中に残留した。 | 1A | High | High | 類似物質1は水中で速やかに変化し、2-エチルヘキサノ酸及び不溶性鉛が生成した。2-エチルヘキサノ酸は微生物により分解され、不溶性鉛は試験液中に残留した。 評価対象物質の解離により生成すると考えられる類似物質2は、類似物質1からの類推により、良分解性判定がなされている。 類似物質3はエステルが加水分解し、2-エチルヘキサノ酸とエタノール(良分解性)が生成すると考えられ、同様に、類似物質4は、2-エチルヘキサノ酸とプロパン-2-オール(良分解性)を生成すると考えられるが、分解度試験での分解度はそれぞれ67%、74.6%となっており、2-エチルヘキサノ酸も分解したと考えられる。 | |
| | 類似物質2 | 2-エチルヘキサノ酸 | | 良分解性 (類似物質1か ら類推) ² | REACH 登録情報 ³ | 2 | (OECD TG301E, 非GLP, 28日) DOC removal: 99% | - | 1B | High | High | | |
| | | | | | | | 3 | (EU Method C.5, 非GLP, 20日) Bio-oxidation: 83% | 易分解性試験ではないが、追加情報として収集した。 | 1B | N.A. | | N.A. |
| | | | | | | | 4 | (OECD TG302B, 非GLP, 6日) TOC removal: >85% | 易分解性試験ではないが、追加情報として収集した。 | 1B | N.A. | | N.A. |
| | | | | | | | 5 | (ガイドライン無し, 非GLP, 15日) 半減期: < 180 h | 易分解性試験ではないが、追加情報として収集した。 | 2A | Mid | | Mid |
| | 類似物質3 | エチル=2-エチルヘキサノート | | - | REACH 登録情報 ⁴ | 6 | (OECD TG301D, OECD GLP, 28日) O2 consumption: 67% | - | 1A | High | High | | |
| | 類似物質4 | イソプロピル=2-エチルヘキサノート | | - | REACH 登録情報 ⁵ | 7 | (OECD TG310, OECD GLP, 28日) CO2 evolution: 74.6% | - | 1A | High | High | | |

評価に用いていないデータは灰色 ()。サポート情報は薄青色 ()。N.A.はNot Appropriateの略。

参考文献

1. (結果番号 1) 化学物質安全性点検結果等（分解性）《経済産業省》
https://www.nite.go.jp/chem/jcheck/tempfile_list.action?tpk=18268&ppk=3697&kinou=100&type=ja
(2024/07/17 閲覧)
2. 化学物質安全性点検結果等（分解性）《経済産業省》
https://www.nite.go.jp/chem/jcheck/tempfile_list.action?tpk=18227&ppk=2618&kinou=100&type=ja
(2024/07/17 閲覧)
3. (結果番号 2～5) ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals – Registered substances.
https://chem.echa.europa.eu/100.019.660/dossier-view/99f6c0b6-6074-47aa-95bb-0c70859fac5e/005223d0-caf2-42c4-b012-7392d20d162f_ed228295-535d-40b2-acf6-ee4bddfdd17f
(2024/07/17 閲覧)
4. (結果番号 6) ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals – Registered substances.
https://chem.echa.europa.eu/100.019.131/dossier-view/bb67a89c-450d-4adf-bc04-52f76cbe3ae0/IUC5-d54f16e3-a879-42c8-95e5-3b6893d248d8_09ec3b24-f73a-49d7-9dcf-f6783dbc76c0
(2024/07/17 閲覧)
5. (結果番号 7) ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals – Registered substances.
https://chem.echa.europa.eu/100.060.480/dossier-view/738b73ff-9ecd-4f9a-bfcc-c18169285320/4f30b0b9-a96c-4b6b-9dc6-d4fcbc615e85_f70c25f5-2761-4ce7-9ea2-e1470dcd907d
(2024/07/17 閲覧)