

(案)

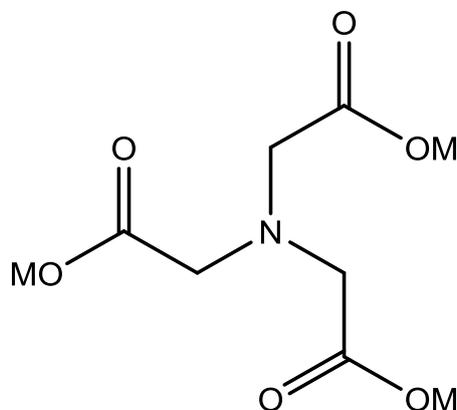
優先評価化学物質のリスク評価 (一次)

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

2, 2', 2''-ニトリロ三酢酸
のナトリウム塩

優先評価化学物質通し番号 152



M=H, Na (少なくとも1つはNa)

平成 29 年 6 月

経済産業省

26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49

目 次

1 評価対象物質の性状	1
1-1 評価対象物質の設定	1
1-2 物理化学的性状及び濃縮性	2
① 融点	2
② 沸点	2
③ 蒸気圧	2
④ 水に対する溶解度	3
⑤ logPow	3
⑥ ヘンリー係数	3
⑦ Koc	3
⑧ BCF	3
⑨ BMF	4
⑩ 解離定数	4
1-3 分解性	5
① 大気	5
② 水中	6
③ 土壌	6
④ 底質	6
2 【付属資料】	8
2-1 物理化学的性状等一覧	8
2-2 出典	8

50

51 1 評価対象物質の性状

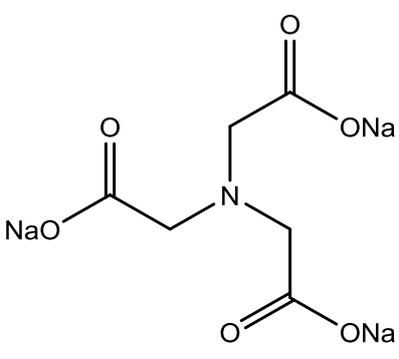
52 本章では、5章のモデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデ
53 ータを示す。

54 1-1 評価対象物質の設定

55 優先評価化学物質である2, 2', 2''-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩は、ナトリウムの置
56 換数によって異なるものが存在する。

57 実際の事業者からの化審法届出情報(H26年度)の照会の結果、3置換体(CAS登録番号：
58 5064-31-3)が大半を占めることがわかっており、評価Ⅱにおいてはトリナトリウム=2, 2', 2''
59 -ニトリロトリアセタート(以下、Na₃NTAと呼ぶ。)を評価対象物質とする。

60

	
評価対象物質名称	トリナトリウム=2, 2', 2'' -ニトリロトリアセタート
分子式	C ₆ H ₆ NNa ₃ O ₆
優先評価化学物質通し番号	152
CAS登録番号	5064-31-3

61

62

63 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

64 下表にモデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。

65 なお、本物質は評価Ⅰ実施時とは置換数が異なるため、表中の参考値は信頼性基準に基づいて
66 設定した場合の評価Ⅰ相当の参考値である。また、採用値における下線は、評価Ⅱにおいて精査
67 した結果、参考値から変更した値であることを示している。

68

69

表 1-1 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ (Na₃NTA)

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰ相当の参考値
分子量	—	260.112	—	260.112
融点	°C	410 ¹⁾	測定値	410 ¹⁾
沸点	°C	4.88 × 10 ² ²⁾	MPBPWIN (v1.43) による推計値	4.88 × 10 ² ²⁾
蒸気圧	Pa	8.07 × 10 ⁻¹¹ ²⁾	MPBPWIN (v1.43) による推計値	8.07 × 10 ⁻¹¹ ²⁾
水に対する溶解度	mg/L	6.40 × 10 ⁵ ¹⁾	測定値	6.40 × 10 ⁵ ¹⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	—	<u>-2.62</u> ¹⁾	推計値	-10.1 ²⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	8.94 × 10 ⁻¹² ²⁾	HENRYWIN (v3.20) による推計値	8.94 × 10 ⁻¹² ²⁾
有機炭素補正 土壌吸着係数 (Koc)	L/kg	<u>26.3</u> ²⁾	KOCWIN (v2.00) による推計値	3.27 × 10 ⁻⁶ ²⁾
生物濃縮係数 (BCF)	L/kg	<u>3</u> ¹⁾	測定値	3.162 ²⁾
生物蓄積係数 (BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ³⁾	1
解離定数 (pKa)	—	<u>1.4, 2.2,</u> <u>3.0, 9.8</u> ⁴⁾⁵⁾	複数の推計値の算術平均値	— ⁶⁾

1) EU RAR (2005)

2) EPI Suite (2012)

3) MHLW, METI, MOE (2014)

4) SPARC (2013)

5) ACD (2015)

6) 評価Ⅰ段階では解離定数を考慮しない

70

71 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

72 ① 融点

73 参考値 410°C は、EU RAR の測定値である。また、その他の信頼性の定まった情報源か
74 ら測定値は得られなかった。

75 そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 410°C を用いる。

76

77 ② 沸点

78 参考値 4.88 × 10² °C は、EPI Suite の MPBPWIN (v1.43) による推計値である。また、そ
79 の他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

80 そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 4.88 × 10² °C を用いる。

81

82 ③ 蒸気圧

83 参考値 8.07 × 10⁻¹¹ Pa は、EPI Suite の MPBPWIN (v1.43) による推計値である。また、そ
84 の他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

85 そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 8.07 × 10⁻¹¹ Pa を用いる。

86

87 ④ 水に対する溶解度

88 参考値 6.40×10^5 mg/L は、EU RAR の 20°C における測定値である。また、その他の信頼
89 性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

90 そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 6.40×10^5 mg/L を用いる。

91

92 ⑤ logPow

93 参考値 -10.1 は、EPI Suite の KOWWIN (v1.68) による推計値である。その他の信頼性の
94 定まった情報源から測定値は得られていないが、EU RAR では Key Study として推計値
95 -2.62 が採用されており、同様の値が複数の情報源において記載されている。

96 そのため、評価Ⅱにおいては、生態影響に係る暴露推計においてより安全側となる EU
97 RAR の推計値 -2.62 を用いる。

98

99 ⑥ ヘンリー係数

100 参考値 8.94×10^{-12} Pa·m³/mol は、EPI Suite の HENRYWIN (v3.20) による推計値(Bond
101 Estimation Method)である。また、他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなか
102 った。

103 そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 8.94×10^{-12} Pa·m³/mol を用いる。

104

105 ⑦ Koc

106 参考値 3.27×10^{-6} L/kg は、EPI Suite の KOCWIN (v2.00) による推計値(Log Kow
107 Estimation Method)である。また、その他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られ
108 ていないが、KOCWIN については別の推計値(MCI Estimation Method)として 26.3 L/kg
109 も得られている。土壌への吸着が高いイオン性の物質については、イオン性による logP 値
110 低下による影響が抑えられ、また、こちらの方が若干ではあるが推計精度が高いとされて
111 いる。

112 そのため、評価Ⅱにおいては、KOCWIN による推計値(MCI Estimation Method)26.3
113 L/kg を用いる。

114

115 ⑧ BCF

116 参考値 3.162 L/kg は、EPI Suite の BCFBAF(v3.01) による推定値(Log Kow Estimation
117 Method)である。その他の信頼性の定まった情報源においては EU RAR からゼブラフィッ
118 シュの測定値 1~3 L/kg が得られており、Key Study として 3 L/kg が採用されている。ま
119 た、その他の情報源においては、ECHA にも同様の値が掲載されている。

120 そのため、評価Ⅱにおいては、EU RAR の測定値 3 L/kg を用いる。

121

122 ⑨ BMF

123 参考値 1 は、logPow と BCF から技術ガイダンスに従って設定された値である。また、
124 他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

125 そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 1 を用いる。

126

127 ⑩ 解離定数

128 評価Ⅰにおいては解離を考慮しないため、参考値は設定されていない。また、信頼性の
129 定まった情報源から測定値は得られていない。Na₃NTA は NTA の 3 置換体であるため多段
130 階解離し、その他の情報源において SPARC では推計値 1.38、2.18、2.98、9.85 が、
131 ACD/Percepta では同様の推計値 1.5±0.1、2.3±0.1、3.0±0.1、10.3±0.1(Classic Module)及
132 び 1.2±0.4、2.2±0.4、3.1±0.5、9.1±0.5(GALAS Module)が得られている

133 そのため、評価Ⅱにおいては、これらの推計値の算術平均値 1.4、2.2、3.0、9.8 を用い
134 る。

135 また、上記の pKa 値より、本物質は pH5~9 の実環境中では主に NH⁺(COO⁻)₃として存
136 在し、その存在比率は、pH=5 で 99%、pH=6 で 100%、pH=7 で 100%、pH=8 で 99%、
137 pH=9 で 88%である(SPARC)。

138

139

140 1-3 分解性

141 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

142

143

表 1-2 分解に係るデータのまとめ (Na₃NTA)

項目		半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA
	機序別の 半減期	OH ラジカルとの反応	0.22 ¹⁾
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
水中	水中における総括分解半減期		NA
	機序別の 半減期	生分解	5 ²⁾
		加水分解	NA
		光分解	NA
土壌	土壌における総括分解半減期		NA
	機序別の 半減期	生分解	9 ²⁾
		加水分解	NA
底質	底質における総括分解半減期		NA
	機序別の 半減期	生分解	20 ²⁾
		加水分解	NA

144

1) EPI Suite (2012)

145

2) EU RAR (2015)

146

NA: 情報が得られなかったことを示す

147

148 上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、「総括分解半減期」とは、分解の
149 機序を区別しない環境媒体ごとのトータルの半減期のことを示す。

150

151 ① 大気

152 大気中での総括分解半減期に係る情報は得られなかったが、OH ラジカルに係る機序別の
153 情報が得られた。

154 ①-1 : OH ラジカルとの反応の半減期

155 信頼性における情報源において測定値は得られなかったが、EPI Suite の
156 AOPWIN(v.1.92)により反応速度定数の推計値 $7.41 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 / \text{ molecule/s}$ が得られている。
157 大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンス(MHLW, METI, MOE (2014))より 5×10^5
158 molecule/cm^3 とした場合、半減期は 0.22 日と算出される。

159 評価Ⅱではこの値 0.22 日を用いる。

160 ①-2 : オゾンとの反応の半減期

161 大気中でのオゾンとの反応の半減期に係る情報は得られなかった

162 ①-3：硝酸ラジカルとの反応の半減期

163 大気中での硝酸ラジカルとの反応の半減期に係る情報は得られなかった

164

165 ② 水中

166 水中での総括分解半減期に係る情報は得られなかったが、生分解に係る機序別の情報が
167 得られた。

168 ②-1：生分解の半減期

169 信頼性における情報源において EU RAR、HSDB で様々な測定値が得られており、EU
170 RAR では、数時間から数日の半減期が得られているが温度影響も大きいため暴露評価に用
171 いる半減期として 5 日が採用されている。また、その他の情報源においては、ECHA に同
172 様の値が掲載されている。

173 評価Ⅱでは、この値 5 日を用いる。

174 ②-2：加水分解の半減期

175 水中での加水分解半減期に係る情報は得られなかった。

176 ②-3：光分解の半減期

177 水中での光分解半減期に係る情報は得られなかった。

178 なお、EU RAR においては、生分解が主機序のため暴露評価においては光分解を考慮す
179 る必要はないとしている。

180

181 ③ 土壌

182 土壌での総括分解半減期に係る情報は得られなかったが、生分解に係る機序別の情報が
183 得られた。

184 ③-1：生分解の半減期

185 信頼性における情報源において EU RAR では様々な測定値(0.78 日、<3 日、9 日等)が得
186 られており、暴露評価に用いる半減期としては、1~9 日のうちワーストケースの 9 日が採
187 用されている。また、その他の情報源においては、ECHA に EU RAR と同様の値が掲載さ
188 れている。

189 評価Ⅱでは、この値 9 日を用いる。

190 ③-2：加水分解の半減期

191 土壌での加水分解半減期に係る情報は得られなかった。

192

193 ④ 底質

194 底質での総括分解半減期に係る情報は得られなかったが、生分解に係る機序別の情報が
195 得られた。

196 ④-1：生分解の半減期

197 信頼性における情報源において EU RAR では好気性の測定値として 30℃の 1 日を実環境

198 温度条件に補正した 9 日と、それをさらに嫌気性へと外挿した 20 日が暴露評価に用いる半
199 減期として採用されている。また、その他の情報源においては、ECHA に同様の値が掲載
200 されている。

201 評価Ⅱでは、この値 20 日を用いる。

202 ④-2：加水分解の半減期

203 底質での加水分解半減期に係る情報は得られなかった。

204

205 **2 【付属資料】**

206 **2-1 物理化学的性状等一覧**

207 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

208

209 **2-2 出典**

210

211 ACD(2015):ACD/Labs Percepta Ver.14.0.0

212 ECHA: Information on Chemicals - Registered substances.

213 <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances> (2016.12 調査).

214 EPI Suite(2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11,.

215 EU RAR(2015): ECB, Trisodium nitrilotriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.:

216 225-768-6)

217 MHLW, METI, MOE(2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術

218 ガイダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

219 SPARC(2013): ARChem's physicochemical calculator

220 <http://www.archemcalc.com/sparc.html>

221