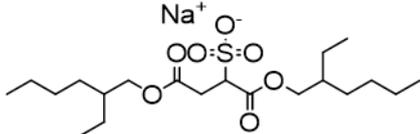


優先評価化学物質の分解性の評価（案）

評価結果	良分解性
優先評価 化学物質	通し番号：213 官報公示名称：ナトリウム＝1，4－ビス〔（2－エチルヘキシル）オキシ〕－1，4－ジオキソブタン－2－スルホナート 官報公示整理番号：2-1620、2-1623
評価対象 物質	物質名称：ナトリウム＝1，4－ビス〔（2－エチルヘキシル）オキシ〕－1，4－ジオキソブタン－2－スルホナート CAS RN [®] ：577-11-7 分子量：444.56 分子式：C ₂₀ H ₃₇ NaO ₇ S 構造式： 
分解性 評価	<p>評価対象物質の分解性</p> <p>評価対象物質は、既存化学物質安全性点検（以下、「既存点検」）による OECD TG301C 試験結果（結果番号 1）を基に難分解性と判定されているものの、OECD TG301C 以外の 4 種類のテストガイドラインによる易分解性試験結果（結果番号 2～5）においてパスレベルを超える分解度が得られており、環境中で分解すると考えられる。</p> <p>評価対象物質の既存点検による OECD TG301C 試験で分解性が低かった理由として、汚泥 + 被験物質系は試験開始 22 日以前まで汚泥ブランク系より BOD 値が低く、100 mg/L の被験物質濃度で汚泥（微生物）に対する抑制が生じた可能性が考えられる。また、OECD TG301C と OECD TG301F 等の試験結果を比較した場合、OECD TG301C が分解しにくい傾向にあることが報告¹されている。</p> <p>評価の不確実性：低い（複数の妥当性の高い試験結果等に基づく）</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>既存点検による OECD TG301C 試験において、評価対象物質の 2－エチルヘキシル基部分が 1 個外れたと推定される変化物が検出されている。また、OECD TG301C 以外の 4 種類のテストガイドラインによる試験結果においては、分解度が 70% 以上となり、ほぼ全量分解した結果が得られている。以上のことより、評価対象物質の 2－エチルヘキシル基部分が加水分解し、生成した 2－エチルヘキシルアルコール（良分解性判定済み）は分解し、評価対象物質全体も最終的に無機化するものと考えられる。</p> <p>評価対象物質から 2－エチルヘキシル基部分が加水分解して生成したスルホこはく酸ナトリウムについては、その環境中での究極生分解を支持する研究結果が報告されている^{2,3}。</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、ナト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（複数の妥当性の高い試験結果等に基づく）</p>

評価に用いた主な情報（評価対象物質・実測試験結果）

結果番号	1	2	3	4	5
化審法 分解性判定	難分解性 (分解性試験結果)	-	-	-	-
情報源	化審法既存点検 ⁴	REACH 登録情報 ⁵	REACH 登録情報 ⁶	REACH 登録情報 ⁷	REACH 登録情報 ⁸
試験法名	OECD TG301C	OECD TG310	OECD TG301F	OECD TG301B	OECD TG301D
GLP 適合	OECD GLP	OECD GLP	非 GLP	OECD GLP	非 GLP
被験物質 濃度	100 mg/L	10 mg/L	107 mg/L	20 mg/L	3 mg/L
植種源	標準活性汚泥	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	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下水
植種濃度	30 mg/L	4 mg/L	30 mg/L	30 mg/L	1mL/L
試験期間 [日]	28	28	28	29	30
分解度[%] /半減期*	BOD: 3 TOC: 13 HPLC: 32	inorg. C analysis: 91.2	BOD: 73.6~78.3 DOC removal: 100	inorg. C analysis: 83.5~103.6	DOC removal: 93 (28日)
信頼性	1A	1A	1B	1A	1B
関連性	High	High	High	High	High
妥当性	High	High	High	High	High
備考	BOD で分解が認められた試験液について、LC-MS による変化物同定の結果、本体から 2-エチルヘキシル基部分が 1 個外れたものと推定された。	-	-	-	-

* 試験期間と異なる場合に()で測定日を記載

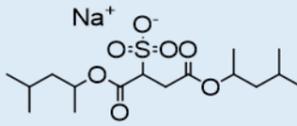
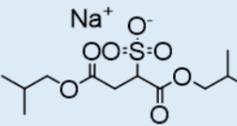
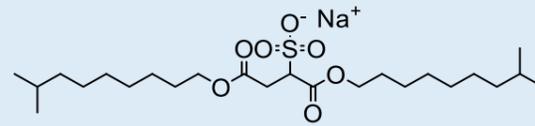
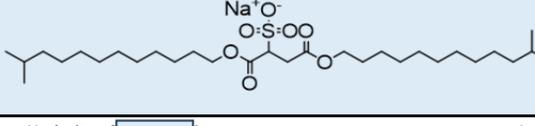
収集情報の評価結果

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	化審法既存点検	1	化審法分解性判定: 難分解性 (OECD TG301C、OECD GLP、28日) BOD: 3 % TOC: 13 % HPLC: 32 %	(汚泥+被験物質)系1点において、 2-エチルヘキシル基部分が1個外れた 変化物が生じたと推察されている。な お、生成が予測される2-エチルヘキ シルアルコールは良分解性である。 HPLCによる被験物質残留は33%で あり、残り67%から2-エチルヘキ シル基部分が1個分解したと仮定した 場合のDOC分解度理論値と実測値 がほぼ一致する。	1A	High	High	あり (評価対象物質は、既存化学物質安全性点検(以 下、「既存点検」)によるOECD TG301C試験結果 を基に難分解性と判定されているものの、OECD TG301C以外の4種類のテストガイドラインによる易分 解性試験結果においてパスレベルを超える分解度が得 られている。 既存点検によるOECD TG301C試験において、分解 性が低かった理由として、汚泥+被験物質系は試験 開始22日以前まで汚泥ブランク系よりBOD値が低く、 100mg/Lの被験物質濃度では汚泥(微生物)に 対する抑制作用が生じた可能性が考えられる。また、 OECD TG301CとOECD TG301F等の試験結果を 比較した場合、OECD TG301Cが分解しにくい傾向 にあることが報告されている。)	強い	低い (複数の妥当性の 高い易分解性試験 結果がある。)	あり (実測、類推)	強い	低い (複数の妥当 性の高い易分 解性試験結果 等に基づく。)	あり (易分解性、シ ミュレーション、そ の他)	強い	低い (複数の妥当 性の高い試験 結果等に基づく。)							
						1A	High	High																
						1A	High	High																
						2	(OECD TG310、OECD GLP、28日) inorg. C analysis: 91.2 %	-										1A	High	High				
						3	(OECD TG301F、非GLP、28日) BOD: 73.6~78.3 % DOC removal: 100 %	-										1B	High	High				
	REACH登録情報	4	(OECD TG301B、OECD GLP、29日) inorg. C analysis: 83.5~103.6 %	-	1B	High	High																	
		5	(OECD TG301D、非GLP、30日) DOC removal: 93 % (28日)	-	1A	High	High																	
		類推	類似物質1~4に基づく類推	※別紙2 参照	易分解性	-	2B	High										High	中程度	低い (易分解性と十分 に判断できる類似物 質からの類推。)				
		QSAR* (分解度)	CATALOGIC 301C v.11.15	-	BOD: 38 % 親物質残留率: 0 %	代謝マップに複数の変化物あり。	-	-										Mid	無し (CATALOGIC 301C モデルにおいては、トレーニン グセットに評価対象物質のOECD TG 301C試験結 果(難分解性)が含まれているため、難分解性と予 測されると考えられる。)	証拠の重み付 けができない。	-	あり	強い	低い
			CATALOGIC Kinetic 301F v.13.16	-	BOD: 62 % 親物質残留率: 0 %	代謝マップに複数の変化物あり。	-	-										Low						
CATALOGIC Kinetic 301B v.02.09	-		CO2: 46.1 % 親物質残留率: 0 %	代謝マップに複数の変化物あり。	-	-	N.A.																	
QSAR* (定性)	Danish QSAR v.1	-	易分解性	-	-	-	Low																	
	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	-	難分解性	-	-	-	-	N.A.																	
本質的 分解性	実測	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
	類推	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
	QSAR	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
シミュレ ーション	実測	REACH登録情報	-	(ISO 11733、非GLP、19日) MBAS: 95 %	-	1B	Mid	Mid	中程度	中程度 (信頼性ランク1Bの 1試験のみ。)	-	中程度	中程度 (信頼性ランク 1Bの1試験の み。)											
	類推	-	-	-	-	-	-	-	-	-														
	QSAR* (半減期)	VEGA Persistence (sediment) quantitative model v.1.0.1	-	13 days	-	-	-	N.A.																
		VEGA Persistence (soil) quantitative model v.1.0.1	-	23 days	-	-	-	N.A.																
VEGA Persistence (water) quantitative model v.1.0.1		-	6 days	-	-	-	N.A.																	
その他	実測 (嫌氣的生分解性)	REACH登録情報	-	(DIN 38414 Teil 8、非GLP、50日) degradation:77% (21日) 半減期: 約40 d (21日)	-	2A	Mid	Mid	中程度	高い (信頼性ランク2Aの 1試験のみ。)	-	中程度	高い (信頼性ランク 2Aの1試験の み。)											
	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																
	BiHCwin 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: 0.1 %	複数の変化物あり。	-	-	Low	無し	証拠の重み付 けができない。	-														
QSAR* (嫌氣的生分解性)	BIOWIN7 v.4.10	-	難分解性	-	-	-	Low																	

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	ナトリウム = 1, 4-ビス (1, 3-ジメチルブトキシ) - 1, 4-ジオキソブタン- 2-スルホナート		-	REACH 登録情報	(OECD TG301F, OECD GLP, 60日) O2 consumption: 53.4 % (28日) O2 consumption: 70.8 %	-	1A	Mid	Mid	3つの類似物質の試験結果より、究極的生分解性及び本質的生分解性があると考えられる。 (類似物質2のOECD TG301F試験及び類似物質3のOECD TG301B試験により易分解性の結果が認められる。また、類似物質1、3のOECD TG301Fの試験結果、類似物質3のOECD TG301B試験結果では、60日に延長した結果として究極的生分解性があり、類似物質3のOECD TG302B試験結果では本質的生分解性があると考えられる。)	
						(OECD TG301B, OECD GLP, 60日) CO2 evolution: 46 % (28日) CO2 evolution: 52 % CO2 evolution: 47.2 % (28日) CO2 evolution: 58.2 %		1A	High	High		
						1A		Mid	Mid			
						1A		Mid	Mid			
	類似物質2	ナトリウム = 1, 4-ジイソブ トキシ-1, 4-ジオキソブタ ン-2-スルホナート		-	REACH 登録情報	(OECD TG301F, OECD GLP, 60日) O2 consumption: 70 % (28日)	-	1A	High	High		
						1A		High	High			
	類似物質3	ナトリウム = 1, 4-ジイソデ シル = 2-スルホナトスクシ ナート		-	REACH 登録情報	(OECD TG301B, OECD GLP, 60日) CO2 evolution: 14.4 % (28日) CO2 evolution: 63.9 % CO2 evolution: 26.2 % (28日) CO2 evolution: 78.1 %	-	1A	High	High		
						1A		High	High			
						1A		High	High			
						1A		High	High			
						(OECD TG302B, OECD GLP, 28日) DOC removal: 91 % inorg. C analysis: 58 % (14日)		易分解性試験ではないが、追加情報として収集した。	1A	High		High
						1A		Mid	Mid			
	類似物質4	ナトリウム = 1, 4-ジイソトリ デシル = スルホナトスクシナート		-	REACH 登録情報	(OECD TG301B, OECD GLP, 28日) TOC removal: 7 %	-	1A	Mid	Mid		
1A						Mid		Mid				

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. 平成 23 年度経済産業省委託研究「化学物質の試験方法開発等」報告書
<https://dl.ndl.go.jp/pid/11240447>
2. Masuda(1993): Masuda, M. et al. Biodegradation of 2-Sulfonatofatty Acid Methyl Ester (α - SFMe) .II. Biodegradation Pathways of α - SFMe. Journal of Japan Oil Chemists' Society. Vol. 42. No. 11, 1993.
3. Masuda(1994): Masuda, M. et al. Biodegradation of 2-Sulfonatofatty Acid Methyl Ester (α -SFMe). III. Ultimate Biodegradation of α - SFMe by Activated Sludge. Journal of Japan Oil Chemists' Society. Vol. 42. No. 11, 1993.
4. (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=39018&ppk=3936&kinou=100&type=ja
(2024/07/17 閲覧)
5. (結果番号 2)ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals – Registered substances.
<https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/16066/5/3/2/?documentUUID=48a3b36c-c8cd-4544-8a1f-696f134e4521>
(2024/07/17 閲覧)
6. (結果番号 3)ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals – Registered substances.
<https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/16066/5/3/2/?documentUUID=c238e5dd-207e-43e4-8c11-ad8bc3dff247>
(2024/07/17 閲覧)
7. (結果番号 4)ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals – Registered substances.
<https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/16066/5/3/2/?documentUUID=d58e9e09-22c7-4cbc-a8c6-ea8557c67958>
(2024/07/17 閲覧)
8. (結果番号 5)ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals – Registered substances.
<https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/16066/5/3/2/?documentUUID=c7edcfe5-3e66-4767-96c6-1769d3066718>
(2024/07/17 閲覧)