

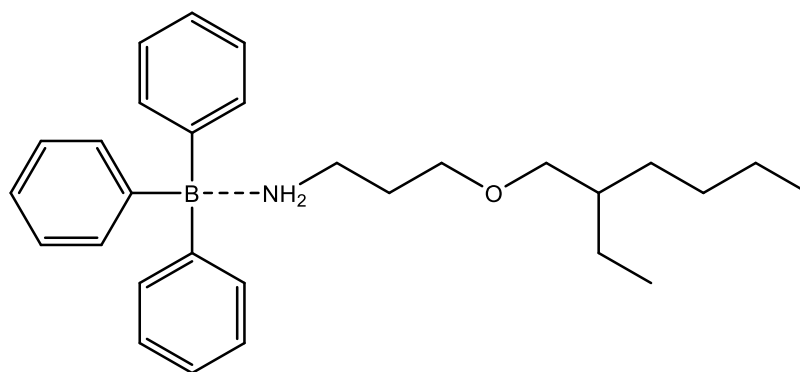
1
2
3
4 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

5 生態影響に係る評価Ⅱ

6 物理化学的性状等の詳細資料

7
8
9 [3-（2-エチルヘキシルオキシ）プロピル
10 アミン]トリフェニルホウ素（Ⅲ）

11
12 優先評価化学物質通し番号 71



15
16
17
18
19 平成 30 年 3 月

20
21 経済産業省
22

目 次

23	
24	
25	1 評価対象物質の性状 3
26	1 - 1 評価対象物質の設定 3
27	1 - 2 物理化学的性状及び濃縮性 3
28	1 - 3 分解性 6
29	1 - 4 出典 9
30	
31	
32	

1 評価対象物質の性状

1-1 評価対象物質の設定

本章では、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ータを示す。

本物質の用途（漁網用防汚剤）から考えて、海水中(pH≒8)で主な存在形態である非解離種を評価対象物質とする。

1-2 物理化学的性状及び濃縮性

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。なお、表中の下線部は、評価Ⅱにおいて精査した結果、評価Ⅰから変更した値を示している。

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

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	428.45	—	428.45
融点	°C	<u>69.5</u>	濃縮度試験 ¹⁾ 及び分解度試験 ²⁾ の最終報告書に記載されていた値の算術平均値	197.1
沸点	°C	507.5	MPBPWIN (V.1.43) ³⁾ による推計値	507.5
蒸気圧	Pa	<u>3.76×10^{-7}</u>	融点を用いた MPBPWIN (V.1.43) ³⁾ による推計値	2.58×10^{-8}
水に対する溶解度	mg/L	<u>(1.8)</u>	分解度試験及び光分解試験 ⁴⁾ における測定値を 20°C に補正した値の算術平均値	3.48×10^{-5}
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	8.15	KOWWIN (V.1.68) ³⁾ による推計値	8.15
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>(8.9×10^{-5})</u>	蒸気圧、水に対する溶解度及び分子量から設定 ⁵⁾	0.318
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	$\frac{5.19 \times 10^4}{3.49 \times 10^3}$ (非解離種) (カチオン種)	Franco (2008) ⁶⁾ の式による推計値	2.10×10^5
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	280	濃縮度試験における測定値 ¹⁾	280
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁵⁾	1
解離定数(pKa)	—	7.0	ACD/Percepta 14.0.0 (Build 2254) ⁷⁾ による推計値(本物質は塩基)	— ⁸⁾

※ 平成 28 年度第 2 回優先評価化学物質のリスク評価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（平成 28 年 11 月 17 日）で了承された値

1) CERI (2000)

5) MHLW, METI, MOE (2014)

2) CITI (1999)

6) Franco (2008)

3) EPI Suite (2012)

7) ACD/Labs (2013)

4) Medience (2013)

8) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

括弧内は参考値であることを示す

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

①融点

評価Ⅰで採用した値は、MPBPWIN (v1.43) による推計値 (197.1℃) である。CERI (2000) 及び CITI (1999) においては、融点が 69.3～69.7℃であるとの記載があるため、評価Ⅱにおいてはその算術平均値 (69.5℃) を用いる。

②沸点

評価Ⅰで採用した値は、MPBPWIN (v1.43) による推計値である。また、本物質の分子量及び沸点はトレーニングセットの範囲内である。信頼性の定まった情報源に測定値はなく、評価Ⅱにおいてもこの値 (507.5℃) を用いる。

③蒸気圧

評価Ⅰで採用した値は、MPBPWIN (v1.43) による推計値 (2.58×10^{-8} Pa) である。信頼性の定まった情報源に測定値はなく、評価Ⅱにおいては融点 (69.5℃) を用いた MPBPWIN (v1.43) による推計値 (3.76×10^{-7} Pa) を用いる。

④水に対する溶解度

評価Ⅰで採用した値は、融点 (197.1℃) 及び logPow (8.15) を用いた WSKOWWIN (v1.42) による、25℃における推計値を 20℃に温度補正した値 (3.48×10^{-5} mg/L) である。評価Ⅱにおいては Medience (2013) における、分解度試験及び光分解試験の高濃度区 (飽和溶液) の初期濃度 (2.2, 2.1, 1.8, 1.9, 1.9 mg/L) を 20℃に温度補正したもの (2.1, 2.0, 1.7, 1.7, 1.7 mg/L) の算術平均値 (1.8 mg/L) を参考値として用いる。なお、試験液の pH はそれぞれ、8.3, 8.3, 8.2, 8.2, 8.1 であり、ほとんどが非解離種として存在し、非解離種の水に対する溶解度と見なすことができると考えられた。

⑤logPow

評価Ⅰで採用した値は、KOWWIN (v1.68) による推計値である。信頼性の定まった情報源に本物質のデータはなく、評価Ⅱにおいてもこの値 (8.15) を用いる。なお、KOWWIN による推計値はイオン化のための補正を行っている。

⑥ヘンリー係数

評価Ⅰで採用した値は、蒸気圧 (2.58×10^{-8} Pa)、水に対する溶解度 (3.48×10^{-5} mg/L) 及び分子量 (428.45) を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ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に記載の推計式 $H=VP/(WS/MW)$ に入力して算

出した値 ($0.318 \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$) である。信頼性の定まった情報源に測定値はなく、評価Ⅱにおいては蒸気圧 ($3.76\times 10^{-7} \text{ Pa}$)、水に対する溶解度 (1.8 mg/L) 及び分子量 (428.45) を推計式に入力して算出した値 ($8.9\times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$) を参考値として用いる。この値を非解離種のヘンリー係数と見なした。なお、HENRYWIN による推計は不可能である。

⑦Koc

評価Ⅰで採用した値は、logPow (8.15) を用いた KOCWIN (v2.00) による推計値 ($2.10\times 10^5 \text{ L/kg}$) である。信頼性の定まった情報源に測定値はなく、評価Ⅱにおいては Franco (2008) の式による推計値 ($5.19\times 10^4 \text{ L/kg}$ (非解離種)、 $3.49\times 10^3 \text{ L/kg}$ (カチオン種)) を用いる。

⑧BCF

評価Ⅰで採用した値は、CERI (2000) の濃縮度試験¹における低濃度区 (0.001 mg/L) の定常状態における有機ホウ素の濃縮倍率である。評価Ⅱにおいてもこの値 (280 L/kg) を用いる。

⑨BMF

評価Ⅰで採用した値は、logPow (8.15) 及び BCF (280 L/kg) から技術ガイダンスに従って設定したものである。BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅱにおいてもこの値 (1) を用いる。

⑩pKa

本物質はアミノ基を有し、塩基である。評価Ⅱでは、ACD/Percepta 14.0.0 (Build 2254) の pKa GALAS Module による推計値 (7.0) を用いる。pKa= 7.0 であるため、水中では pH 5.0 、 6.0 、 7.0 、 8.0 、 9.0 、 10.0 においてそれぞれ 1% 、 10% 、 52% 、 91% 、 99% 、 100% が非解離種として存在すると判断された。

¹ 濃縮度試験では、「3- (2-エチルヘキシルオキシ) プロピルアミン」及び「トリフェニルホウ酸」を分析対象としており、アミンの低濃度区 (0.001 mg/L) の定常状態における濃縮倍率は 18 L/kg 倍以下であった。

1-3 分解性

下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

表 1-2 分解に係るデータのまとめ

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	0.3	AOPWIN (V. 1.92) ¹⁾ により推計。反応速度定数の推定値から、OH ラジカル濃度を 5×10^5 molecule/cm ³ として算出
		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	39	海水における生分解試験結果に基づく半減期 ²⁾
		加水分解	3,500	海水における加水分解試験結果に基づく半減期 ²⁾
		光分解	78	海水における光分解試験結果に基づく半減期 ²⁾ を水中での光透過率等を考慮し補正した値
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	39	水中生分解の項参照
		加水分解	3,500	水中加水分解の項参照
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	156	水中生分解の項参照
		加水分解	3,500	水中加水分解の項参照

※ 平成 28 年度第 2 回優先評価化学物質のリスク評価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（平成 28 年 11 月 17 日）で了承された値

1) EPI Suite(2012)

2) Medience(2013)

NA:情報が得られなかったことを示す

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。

①大気

大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期についても、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかったため、AOPWIN (v1.92) により推計された 5.03×10^{-11} cm³/molecule/s を半減期算出に採用する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm³ とした場合、半減期は 0.3 日と算出される。評価Ⅱではこの値（0.3 日）を用いる。

②水中

水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解と加水分解と光分解の機序別の半減期に関する情報が得られた。

②-1 生分解の半減期

Medience (2013) において、天然海水を用いて pH8.3、25℃、暗所で 63 日間の生分解試験を行ったところ、第一濃度区 (1~2 mg/L) 及び第二濃度区 (0.1~0.2 mg/L) の半減期はそれぞれ 154 日及び 39 日であった。Medience (2013) において、第一濃度区では第二濃度区より微生物に対する阻害作用が働いたとの考察があり、評価Ⅱでは生分解による半減期を 39 日とする。

なお、CITI (1999) によれば、被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L で 28 日間試験を行った結果、BOD 分解度は 0 %であった。

②-2 加水分解の半減期

Medience (2013) において、人工海水を用いて pH8.2、25℃、暗所で 28 日間の加水分解試験を行ったところ、第一濃度区 (1~2 mg/L) 及び第二濃度区 (0.1~0.2 mg/L) の半減期はそれぞれ 3,500 日及び 169 日であった。評価Ⅱでは加水分解による半減期を 3,500 日とする。

②-3 光分解の半減期

Medience (2013) において、人工海水を用いて屋外 (暴露期間：2012 年 9 月 11 日~10 月 9 日、pH：8.1~8.2、試験温度：21.5~31.1℃、日照時間：0~11.5 時間) で 28 日間の光分解試験を行ったところ、第一濃度区 (1~2 mg/L) 及び第二濃度区 (0.1~0.2 mg/L) の半減期はそれぞれ 22 日及び 12 日であった。評価Ⅱでは 22 日のデータを水中での光透過率等を考慮し、Zepp (1977) に基づき補正した値である 78 日を用いる。なお、本物質はモル吸光スペクトルが得られなかったため、紫外部での吸収は一定、可視部での吸収はないものとして補正した。

なお、壺井 (2012) において、2%塩化ナトリウム水溶液及び人工海水を用いて 25℃かつ照度 1,520~5,390 lux で 48 時間光照射したところ、48 時間後に被験物質の量が約半分になった。

③土壌

土壌中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関する情報も得られなかった。

③-1 生分解の半減期

半減期に関するデータは得られなかったため、土壌中での生分解半減期は、技術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期と同じ 39 日とする。

③-2 加水分解の半減期

170 半減期に関するデータは得られなかったため、土壌中での加水分解半減期は、技術ガイダ
171 ンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ 3,500 日とする。

172

173 ④底質

174 底質中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関す
175 る情報も得られなかった。

176 ④-1 生分解の半減期

177 半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での生分解半減期は、技術ガイダン
178 スに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 156 日とする。

179 ④-2 加水分解の半減期

180 半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での加水分解半減期は、技術ガイダ
181 ンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ 3,500 日とする。

182

1 - 4 出典

- ACD/Labs(2013): ACD/Labs. ACD/Percepta 14.0.0 (Build 2254), 2013.
- CERI(2000): 財団法人化学物質評価研究機構. OPA のコイにおける濃縮度試験. 試験番号 43424, 2000.
- CITI(1999): 財団法人化学品検査協会. OPA の微生物による分解度試験. 試験番号 13423, 1999.
- EPI Suite(2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.
- Franco(2008): Franco, A. and Trapp, S. Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals, Environ. Toxicol. and Chem., 27(10):1995-2004, 2008.
- Medience(2013): 三菱化学メディエンス株式会社. OPA の海水における分解度試験および光分解試験. 試験番号 A100535, 2013.
- 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ガイダンス, Ver. 1.0, 2014.
- Zepp(1977): Zepp, R. G. and Cline, D. M. Rates of direct photolysis in aquatic environment, Environmental Science & Technology., 11(4):359-366, 1977.
- 壺井(2012): 壺井愛, 岡村秀雄. 水環境中におけるトリフェニルボラン化合物の挙動に及ぼす光の影響. 日本海水学会誌. 66(5):275-282, 2012.

情報源略称	詳細等
ACD	ACD/Labs Percepta
CERI	財団法人化学物質評価研究機構
CITI	財団法人化学品検査協会
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite

基本情報

優先通し番号	71
物質名称	[3-(2-エチルヘキシルオキシ)プロピルアミン]トリフェニルホウ素(III)
CAS番号	250578-38-2

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	融点	197.1 °C	197.1	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
2 CERI	融点	69.3-69.7 ° C	69.5								○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3 - (2 - エチルヘキシルオキシ) プロピルアミン] トリフェニルホウ素 (I I I)
CAS番号	250578-38-2

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPaにおける 沸点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	507.5 °C	507.5			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3 - (2 - エチルヘキシルオキシ) プロピルアミン] トリフェニルホウ素 (I I I)
CAS番号	250578-38-2

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20℃における蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	3.76E-07 Pa	3.76E-07	3.76E-07	20 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		4C	○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3 - (2 - エチルヘキシルオキシ) プロピルアミン] トリフェニルホウ素 (I I I)
CAS番号	250578-38-2

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.00003733 mg/L[2C以 下の値を用 いて推定 (4)]	0.00003733	3.48E-05	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		4C	×			
2 Medience	1.8-2.2 mg/L	1.8-2.2	1.8	25-27.7 °C									○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3-(2-エチルヘキシルオキシ)プロピルアミン]トリフェニルホウ素(III)
CAS番号	250578-38-2

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	8.15	8.15			KOWWIN				(Q)SAR		2C	○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3-(2-エチルヘキシルオキシ)プロピルアミン]トリフェニルホウ素(Ⅲ)
CAS番号	250578-38-2

Koc

収集データ

	情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅲにおけ るキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	Koc	210000 L/kg[2C以下の 値を用いて推定 (4)]	210000				KOCWIN				(Q)SAR		4C	×			
2	Franco	Koc	51900 L/kg[2C 以下の値を用い て推定(4)]	51900								(Q)SAR 非解離種		4C	○	3490 L/kg(カチオン種)		

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3-(2-エチルヘキシルオキシ)プロピルアミン]トリフェニルホウ素(III)
CAS番号	250578-38-2

ヘンリー係数

収集データ

	情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	[Incomplete]	算出不可					(Q)SAR		3	×			
2	ヘンリー計算式	0.000089 Pa・m ³ /mol	0.000089								○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3-(2-エチルヘキシルオキシ)プロピルアミン]トリフェニルホウ素 (III)
CAS番号	250578-38-2

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 CERl		2	0.001 mg/L	28日間	BCF		280 L/kg	280	化審法TG						1A	○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3-(2-エチルヘキシルオキシ)プロピルアミン]トリフェニルホウ素(III)
CAS番号	250578-38-2

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	評価IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 ACD/pKa	7.0	7.0				GALAS法				(Q)SAR		○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3-(2-エチルヘキシルオキシ)プロピルアミン]トリフェニルホウ素(III)
CAS番号	250578-38-2

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件 温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ-該 非 (詳細Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		5.03×10^{-11} cm ³ /molecule/sec	5×10^5 molecule/cm ³			0.3										○			
Medience	水中	生分解				39日		39	25℃	8.3	天然海水、暗所							○			
CITI	水中	生分解					0%(BOD分解度)	10000	25℃		化審法TG		yes					×			
Medience	水中	加水分解				3500日		3500	25℃	8.2	人工海水、暗所							○			
Medience	水中	光分解				78日		78	21.5～31.1℃	8.1～8.2	人工海水、屋外							○	実験値22日を水中での光透過率等を考慮し補正した値		
Tsuboi	水中	光分解				約48時間		2	25℃		人工海水							×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	71
物質名称	[3-(2-エチルヘキシルオキシ)プロピルアミン]トリフェニルホウ素(III)
CAS番号	250578-38-2

分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
------	-----	-----	------	-------	-------	-----	-------------	------------------	------	---------	----	----	--------