

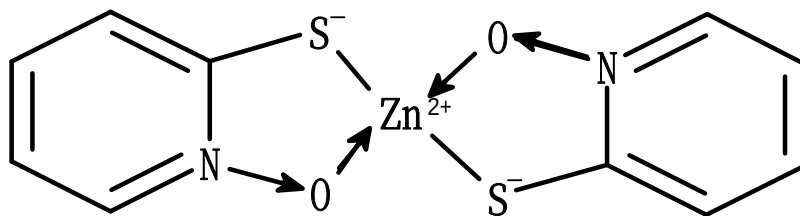
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

人健康影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

(T-4) -ビス[2-(チオキソ- κ S)-ピリジン
-1(2H)-オラト- κ O]亜鉛(Ⅱ)

優先評価化学物質通し番号 139



平成 29 年 3 月

経済産業省

目 次

1		
2	1 評価対象物質の性状	1
3	1-1 物理化学的性状及び濃縮性（亜鉛ピリチオン）	5
4	1-2 分解性（亜鉛ピリチオン）	8
5	1-3 物理化学的性状及び濃縮性（POSA）	11
6	1-4 分解性（POSA）	13
7	1-5 物理化学的性状及び濃縮性（PSA）	15
8	1-6 分解性（PSA）	17
9	1-7 出典	19
10		
11		

1 評価対象物質の性状

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ータを示す。(T-4)ービス[2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO]亜鉛(II)(以下、亜鉛ピリチオン)は水中で光分解・加水分解・生分解によって速やかに変化することが知られている。水中で生じる変化物の種類を調査した。環境省が過去行った亜鉛ピリチオンに対する調査研究の各種文献、REACH 登録情報(ECHA)及び US EPA のリスク評価のための文書¹(以下、US EPA (2004a)、(2004b))を調査対象とした。環境省の文献は光分解と加水分解の情報が中心だったため、生分解については REACH 登録情報及び US EPA (2004) から情報を得た(なお、REACH の登録事業者は US EPA に試験情報を提供した事業者と同じであり内容も重複していることを事業者に確認済)。変化物の生成経路を整理したものを図 1-1 に示す²。

¹ 文書には EPA Subdivision N Pesticide Guideline の試験結果が掲載されている。この試験は米国の FIFRA (Federal Insecticide, Fungicide, and Rodenticide Act: 殺虫剤・殺菌剤・殺鼠剤法)で求められる試験について規定するものであり、OECD のテストガイドラインと同様に公的な試験法と考えられる。殺生物剤の審査では、生成する分解物、代謝物もリスクを考える上で重要な項目である。

² US EPA の文書及び REACH 登録文書には物質名称のみの記載で CAS 登録番号の記載がなかったため構造式は一部推定を含んだものである。

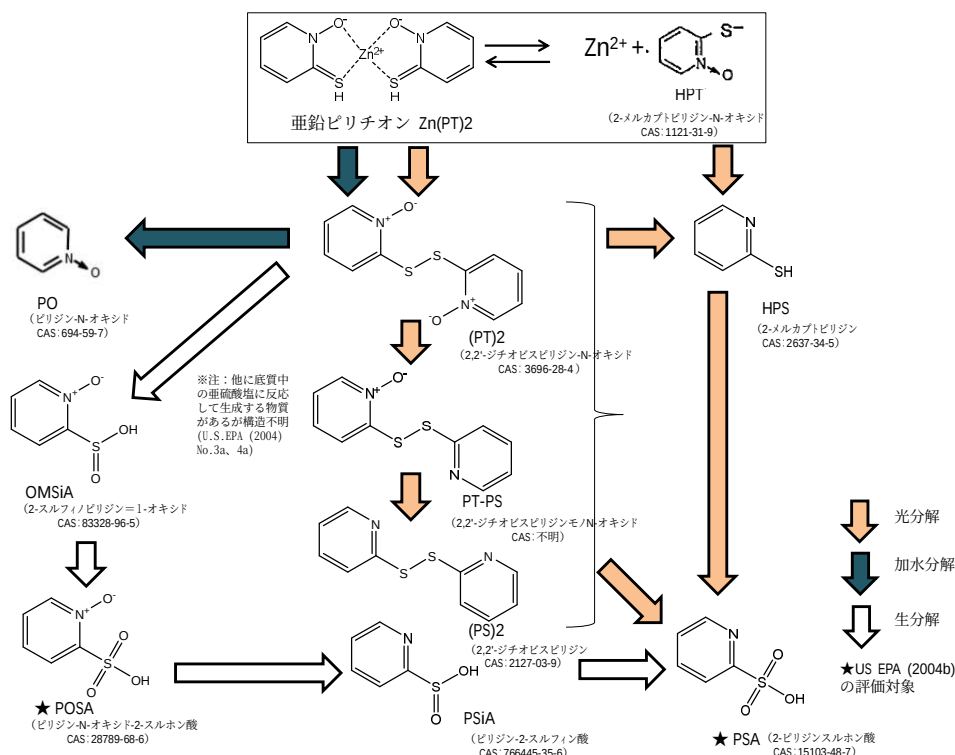


図 1-1 亜鉛ピリチオンの変化物と生成する経路¹

環境省での調査文献の1つである山口ら (2008)に記載されている変化物の光分解における時間変化は図 1-2 に示すとおりである。亜鉛ピリチオン及び変化物は短時間で光分解し、最終的に PSA が残留する。また、Sakkas et al. (2007) によれば主な光分解変化物である PSA、(PS)2、PT-PS、(PT)2 以外に HPS と PO も生成したが他と比較して非常に量が少なかったとしている。

一方、US EPA (2004b)では亜鉛ピリチオンの主要な変化物として POSA と PSA の 2 物質を評価対象物質として選び、生態影響の毒性試験データを収集し有害性評価を行っている。

¹ Lofts, S. 2009 Speciation of pyriothione in freshwaters. NERC/Centre for Ecology and Hydrology, 16pp. (CEH Project Number: C03634) (Unpublished) <http://nora.nerc.ac.uk/9924/2/N009924CR.pdf>

この文献の表 3 によれば平衡定数 (文献内では結合定数と呼称) は次のとおり。

$\text{Zn}^{2+} + \text{PT}^- \rightarrow \text{ZnPT}^+$ 平衡定数 β_1 : $\log \beta_1 = 5.7$

$\text{ZnPT}^+ + \text{PT}^- \rightarrow \text{Zn(PT)}_2$ 平衡定数 β_2 : $\log \beta_2 = 4.4$

これから、 $\text{Zn}^{2+} + 2\text{PT}^- \rightarrow \text{Zn(PT)}_2$ 平衡定数 β : $\log \beta = \log \beta_1 + \log \beta_2 = 10.1$ と計算される

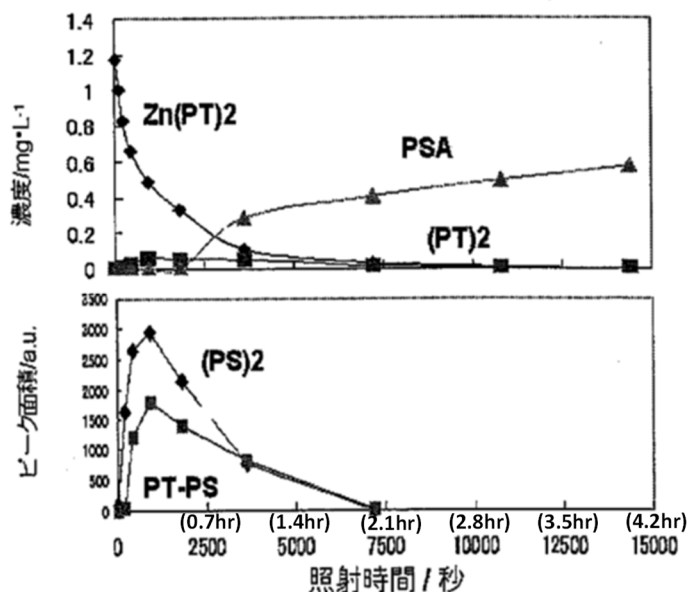


図 1-2 光分解による亜鉛ピリチオンと変化物の時間変化

以上の情報を考慮し、親物質である亜鉛ピリチオン(表 1-1)、変化物である POSA (表 1-2)と PSA (表 1-3) の 3 物質を評価対象物質とする。以降ではこれらの物理化学的性状及び濃縮性の情報を収集し精査した。

表 1-1 評価対象物質(親物質)

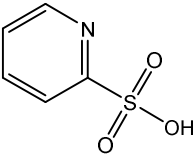
評価対象物質名称	(T-4) -ビス [2-(チオキソ-κ S)- -ピリジン-1(2H)-オラト-κ O] 亜 鉛 (I I)
分子式	C ₁₀ H ₈ N ₂ O ₂ S ₂ Zn
CAS 登録番号	13463-41-7

表 1-2 評価対象物質(変化物 1)

評価対象物質名称	ピリジン-N-オキシド-2-スルホン酸 (POSA)
分子式	C ₅ H ₅ NO ₄ S
CAS 登録番号	28789-68-6

47

表 1-3 評価対象物質（変化物 2）

	
評価対象物質名称	2-ピリジンスルホン酸（PSA）
分子式	C ₅ H ₅ NO ₃ S
CAS 登録番号	15103-48-7

48

49

1-1 物理化学的性状及び濃縮性（亜鉛ピリチオン）

下表にモデル推計に採用した亜鉛ピリチオンの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 1-4 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	—	317.70	—	317.70
融点	°C	238.4 ⁷⁾	範囲での測定値の中央値	267 ²⁾
沸点	°C	497 ³⁾	MPBPWIN (v1.43)による推計値	497 ³⁾
蒸気圧	Pa	7×10^{-7} ²⁾	25°Cでの測定値を 20°Cに換算した値で不等号を外したもの	7×10^{-7} ²⁾
水に対する溶解度	mg/L	5.1 ^{2),4)}	2つの測定値の中央値	5.1 ^{2),4)}
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	1.0 ^{2),8)}	2つの測定値の中央値	0.9 ²⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	4×10^{-5} ⁹⁾	蒸気圧と水溶解度から算出した推計値	5×10^{-5} ²⁾
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	4,340 ¹⁰⁾	4つの測定値の算術平均値	60 ³⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	200 ⁵⁾	定常状態での測定値のうち最大値	200 ⁵⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁹⁾	1
解離定数(pKa)	—	—	測定 ¹¹⁾ 、推計 ^{12),13)} いずれも不可	— ⁶⁾

1) 平成 28 年度第 1 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 9 月 13 日）で了承された値

2) REACH 登録情報 (ECHA)

3) EPI-Suite (2012)

4) METI (2003a)

5) METI (2003b)

6) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

7) METI (2003c)

8) METI (2003d)

9) MHLW, METI, MOE (2014)

10) US EPA (2004a)

11) METI (2003e)

12) SPARC (2011)

13) ACD/Labs (2015)

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、REACH 登録情報 (ECHA) に記載された OECD TG102 に準じて測定された値 (267°C) である。これは 1977 年の測定値であるが、REACH 登録情報 (ECHA) には同じ事業者が報告した 2002 年に OECD TG102 に準じて測定した値として 240°C(分解)という値も記載されていた。両者の被験物質の純度は 98.7%、97.9%で大差はなかった。測定値かどうかは不明だが、HSDB と PhysProp にも 240°Cという値の記載がある。信頼性の定まった情報源の他の測定値としては METI (2003c) に記載された OECD TG102 に準じて測定された、範囲で示された値 (236.1°C～240.7°C) がある。これには被験物質の純度 99.6%で被験物質は融解とともに褐色に変化したと記述されている。評価Ⅱにおいては、融点は

240℃付近の値と考慮して、METI (2003c) の範囲で示された値の中央値 (238.4℃) を用いる。

②沸点

評価Ⅰで採用した値は、MPBPWIN v1.43 により推計された値 (497℃) である。他に信頼性の定まった情報源において測定値は見つからなかったため、評価Ⅱにおいてもこの値 (497℃) を用いる。

③蒸気圧

評価Ⅰで採用した値は、REACH 登録情報 (ECHA) に記載された OECD TG104 に準じて測定された 25℃での値 ($< 1 \times 10^{-6}$ Pa) を 20℃での値に補正したもの ($< 7 \times 10^{-7}$ Pa) を、モデル推計用に不等号を外した値である。他に信頼性の定まった情報源の測定値としては METI (2003f) に記載された 80℃で測定された値しかないので、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同じ値 (7×10^{-7} Pa) をモデル推計や他の物性値の推計に用いる。

④水に対する溶解度

評価Ⅰで採用した値は、信頼性ランク 2B の 2 データの中央値 (5.1 mg/L) である。2 データとは REACH 登録情報 (ECHA) における OECD TG105 に準じた 20℃での測定値 (6.3 mg/L) と METI (2003a) における OECD TG105 に準じた 20℃での測定値 (3.97 mg/L) である。他に信頼性の定まった情報源において測定値は見つからなかったため、評価Ⅱにおいてもこの値 (5.1 mg/L) を用いる。

⑤logPow

評価Ⅰで採用した値は、REACH 登録情報 (ECHA) に記載された OECD TG107 に準じて測定された値 (0.9) である。他に信頼性の定まった情報源の測定値としては METI (2003d) に記載された OECD TG107 に準じて測定された値 (1.01 ± 0.007) がある。評価Ⅱにおいては、これらの値 (0.9、1.01) の中央値 (1.0) を用いる。

⑥ヘンリー係数

評価Ⅰで採用した値は、REACH 登録情報 (ECHA) での推計値 ($< 5 \times 10^{-5}$ Pa・m³/mol) であるが、推計手法は不明である。信頼性の定まった情報源において測定値は見つからなかった。評価Ⅱにおいては水に対する溶解度が 1 mol/L 未満 (1.6×10^{-5} mol/L) のため、技術ガイダンスに従って蒸気圧と水に対する溶解度から算出¹した値 (4×10^{-5} Pa・m³/mol) を用いる。

⑦Koc

評価Ⅰで採用した値は、KOCWIN v2.00 により推計された値 (60 L/kg) である。US EPA (2004a) において、EPA Subdivision N Pesticide Guideline (以下、EPA ガイドラインという) No. 162-1 に基づき淡水の土壌と淡水の底質 (Portland fresh soil, Portland fresh sediment)、塩類土壌と塩類底質 (Marblehead salt soil, Marblehead salt sediment) について脱着過程と吸着過程での平衡定数を測定し、それらを基に Koc を算出している。Koc の値は 2,347 L/kg (塩類土壌)、10,633 L/kg (塩類底質)、784 L/kg (淡水土壌)、3,597 L/kg (淡水底質) であった。評価Ⅱではこれらを算術平均した値 (4,340 L/Kg) を用いる。

¹ 計算式 $H = VP / (WS / MW)$ 、H:ヘンリー係数、VP:蒸気圧、WS:水に対する溶解度、MW:分子量

122

123 ⑧BCF

124 評価Ⅰで採用した値は、METI (2003b) に記載された OECD TG 305 による測定値 (200
125 L/kg) である。評価Ⅰでは試験における定常状態での BCF (第 1 濃度区：160 L/kg、第 2 濃
126 度区：200 L/kg) のうち最大値を用いている。評価Ⅱにおいてもこの値 (200 L/kg) を用いる。

127

128 ⑨BMF

129 評価Ⅰで採用した値は、logPow (0.9) 及び BCF (200 L/kg) から技術ガイダンス に従って
130 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
131 用いる。

132

1-2 分解性（亜鉛ピリチオン）

下表にモデル推計に採用した亜鉛ピリチオンの分解に係るデータを示す。

表 1-5 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	3.4	AOPWIN (V.1.92) ²⁾ 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 $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ 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	15.2	好気性生分解試験の値 ³⁾
		加水分解	120	滅菌した緩衝液の pH = 7 の測定値 ³⁾
		光分解	0.14	超純水に溶解した亜鉛ピリチオンにキセノンランプを照射した試験で光強度と反応速度定数が比例するとして算出したデータを水中での光透過率等を考慮して補正した値 ⁴⁾
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	15.2	水中生分解の項参照
		加水分解	120	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	0.81	好気性試験結果と嫌気性試験結果から算出 ³⁾
		加水分解	120	水中加水分解の項参照

1) 平成 28 年度第 1 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 9 月 13 日）で了承された値。

2) EPI Suite (2012)

3) US EPA (2004a)

4) Yamaguchi et al. (2009)

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 $4.77 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ 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 $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 3.4 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (3.4 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、加水分解、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

US EPA (2004a) において、EPA ガイドライン No. 162-4 に基づいた好気性の生分解試験結果が記載されている。試験は暗室に保って海水とその底質 (Marble Head の Little Harbor)、淡水とその底質 (Portland の Connecticut River) を用いて、放射性同位元素で標識された亜鉛ピリチオンのサンプルで行われた。初期濃度は $1.49 \mu\text{g/L}$ で $25 \pm 1^\circ\text{C}$ に保ち、0、1、3、7、14、21、30 日間後に測定した。抽出されたサンプルは液体シンチレーション計測 (LSC)、高速液体クロマトグラフィー (HPLC) 及び薄層クロマトグラフィー (TLC) を使って分析された。底質と水のサンプルは別々に分析された。分解は 2 相変化で、第 1 相の半減期は 0.065 時間 (海水)、1.3 時間 (淡水)、第 2 相の半減期は 365 時間 (海水)、298 時間 (淡水) であった。第 1 相の短い半減期は底質粒子への吸着に起因すると考えられ、第 2 相が生分解の半減期に相当すると推定される。

なお、METI (2003g) において、被験物質濃度 100 mg/L 、活性汚泥濃度 30 mg/L で 301C 法に基づき 28 日間試験を行った結果、BOD 分解度、HPLC 分解度はどちらも 0 % であった。生分解性の低さは亜鉛ピリチオンが持つ毒性のためと考えられる (HBCE)。評価Ⅱでは生分解による半減期を US EPA (2004a) の結果から最大の 15.2 日 (365 時間) とする。

②-2 加水分解の半減期

US EPA (2004a) において、EPA ガイドライン No. 161-1 に基づき $25 \pm 1^\circ\text{C}$ で暗闇での試験では、殺菌した緩衝液では半減期を 99 日 ($\text{pH} = 5$)、120 日 ($\text{pH} = 7$)、123 日 ($\text{pH} = 9$)、模擬海水では半減期を 96 日 ($\text{pH} = 8.2$) と算出している。評価Ⅱでは加水分解による半減期を $\text{pH} = 7$ の値である 120 日とする。

②-3 光分解の半減期

光分解半減期に関しては環境省の調査研究があり、Yamaguchi, et al. (2009) において、超純水に亜鉛ピリチオンを溶解し、キセノンランプを照射した試験では光強度と反応速度定数が比例するとして 188 W/m^2 (海表面の平均) の場合で半減期は 25 分と算出している。Turley et al. (2000) において、人工海水に 154 W/m^2 のキセノンランプを照射した場合で半減期を 17.5 分と算出し、人工海水を用いた屋外の太陽光下での分解試験 (9 月、北緯 42 度) で半減期を 2 分未満と算出している。US EPA (2004a) において、EPA ガイドライン No. 161-2 に基づき 154.5 W/m^2 キセノンランプ照射した試験で $\text{pH} = 9$ の緩衝液中の半減期を 13 分、模擬海水中の半減期を 17 分と算出している。

評価Ⅱでは、最大の半減期である 25 分の超純水のデータを自然水での値に補正するため、水中での光透過率等を考慮し、山口ら (2005) に記載されている亜鉛ピリチオンの紫外可視吸収スペクトル (波長 290nm 以上は緩やかに変化している) を用いて Zepp, & Cline (1977) に基づき補正した値である 0.14 日 (200 分) を用いる。

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が得られなかった。

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、評価Ⅱでは、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 15.2 日とする。

③-2 加水分解の半減期

半減期に関するデータは得られなかったため、評価Ⅱでは、土壌中での加水分解半減期は

技術ガイダンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ 120 日とする。

④底質

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が、生分解の半減期に関する情報が得られた。

④-1 生分解の半減期

US EPA (2004a) において、EPA ガイドライン No. 162-4 に基づく好気性生分解試験では、放射性同位元素で識別された亜鉛ピリチオンを海水と底質の混合物に添加して LSC と HPLC で分析した結果、底質の半減期を 0.89 日 (海水) と算出している。また、EPA ガイドライン No. 162-3 に基づく嫌気性生分解試験では、放射性同位元素で標識された亜鉛ピリチオンを海水と底質の混合物に添加し、窒素で置換し嫌気性環境を保ち 25℃の暗室で培養して HPLC と TLC で分析した結果、底質の半減期を 18.9 時間 (海水 (Marble Head の Little Harbor))と算出している。他に No. 162-3 に基づく嫌気性生分解試験では底質の半減期を 13.1 時間 (淡水及び海水 (Portland の Connecticut River))と算出しているものがある。技術ガイダンスに従い¹、好气的条件下の半減期 (0.89 日 (海水)) と嫌气的条件下での半減期 (0.79 日 (18.9 時間 (海水))) を利用して底質中での生分解による半減期を 0.81 日と求めた。評価Ⅱでは底質中の生分解半減期を 0.81 日とする。

④-2 加水分解の半減期

半減期に関するデータは得られなかったため、評価Ⅱでは、底質中での加水分解半減期は技術ガイダンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ 120 日とする。

¹ 技術ガイダンス I 章 p.58 の以下の計算式で算出する。

$$k_{deg_{sed}} = Faer_{sed} \cdot k_{bio-aer_{sed}} + (1 - Faer_{sed}) \cdot k_{bio-anaer_{sed}} + k_{abio_{sed}}$$

$k_{deg_{sed}}$: 底質での全分解速度定数[d⁻¹]、 $Faer_{sed}$ (0.25): 底質相における有酸素状態の割合[—]、
 $k_{bio-aer_{sed}}$: 底質での好气的生分解速度定数[d⁻¹]、 $k_{bio-anaer_{sed}}$: 底質での嫌气的生分解速度定数[d⁻¹]、
 $k_{abio_{sed}}$: 底質での非生物的分分解速度定数の和[d⁻¹]

出典: J.P.A. Lijzen and M.G.J. Rikken (eds.) EUSES Background report. RIVM Report no. 601900005/2004, Bilthoven, January 2004 の Page III-90、「III.4.2.7 Biodegradation in soil and sediment」の式(113)

1-3 物理化学的性状及び濃縮性（POSA）

下表にモデル推計に採用した POSA の物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。

表 1-6 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	—	175.16	—	—
融点	℃	142 ²⁾	MPBPWIN (v1.43)による推計値	—
沸点	℃	379 ²⁾	MPBPWIN (v1.43)による推計値	—
蒸気圧	Pa	2.74×10^{-6} ²⁾	MPBPWIN (v1.43) による 20℃の推計値	—
水に対する溶解度	mg/L	(1×10^6) ²⁾	水と自由に混和(WSKOWWIN (v1.42)による推計値及び WATERNT (v.1.01)による推計値より)	—
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	-5.35 ²⁾	KOWWIN (v1.68) による推計値	—
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	9.48×10^{-11} ²⁾	HENRYWIN (v3.20) による 20℃の推計値	—
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	0.0285 ³⁾ （双性イオンの中性種） 8.94（アニオン種） 1.03（カチオン種） 8.94（pH=7.6～8.2における値）	Franco ら(2008)の推計式より	—
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	1.3	カテゴリーアプローチより ⁴⁾	—
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁴⁾	—
解離定数(pKa)	—	-2.9（酸） 2.7（塩基）	ACD/Percepta 14.0.0 (Build 2726)より算出 ⁵⁾	—

1) 平成 28 年度第 1 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 9 月 13 日）で了承された値。ただし、Koc の双性イオンの中性種以外の値は別途計算した。

2) EPI Suite(2012)

3) Franco ら(2008)

4) MHLW, METI, MOE(2014)

5) ACD/Labs(2015)

括弧内の値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

信頼性の定まった情報源からは、融点に関する情報は得られなかったため、MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値 (142℃)を評価Ⅱで用いる。

②沸点

信頼性の定まった情報源からは、融点に関する情報は得られなかったため、MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値 (379℃)を評価Ⅱで用いる。

③蒸気圧

信頼性の定まった情報源からは、蒸気圧に関する情報は得られなかったので、測定値がなく、MPBPWIN (v1.43) を用いた 20°C の推計値 (2.74×10^{-6} Pa) を評価Ⅱで用いる。

④水に対する溶解度

信頼性の定まった情報源からは、水溶解度に関する情報は得られなかった。WSKOWWIN (v1.42) の推計値及び WATERNT (v1.01) の推計値が 1×10^6 mg/L を超えたため、 1×10^6 mg/L と推計された。EPI Suite では推計値を 1×10^6 mg/L を超えるものは水と自由に混和する (miscible) としている¹。これに従い、評価Ⅱでは参考値として推計値 (1×10^6 mg/L) を用いる。

⑤logPow

信頼性の定まった情報源からは、logPow に関する情報は得られなかったので、KOWWIN (v1.68) を用いた推計値 (-5.35 (双性イオンの中性種)) を評価Ⅱで用いる。

⑥ヘンリー係数

信頼性の定まった情報源からは、ヘンリー係数に関する情報は得られなかったので、HENRYWIN (v3.20) を用いた 20°C の推計値 (9.48×10^{-11}) を評価Ⅱで用いる。

⑦Koc

信頼性の定まった情報源からは、Koc に関する情報は得られなかったので、Franco ら (2008) による Koc 推計式を用いた値 (0.0285 L/kg (双性イオンの中性種)) を評価Ⅱで用いる。

⑧BCF

信頼性の定まった情報源からは、BCF に関する情報は得られなかったので、評価Ⅱでは NITE カテゴリーアプローチにより類推した値 (1.3) を用いる。

⑨BMF

信頼性の定まった情報源からは、BMF に関する情報は得られなかったので、評価Ⅱでは logPow (-4.49) 及び BCF (1.3 L/kg) から技術ガイダンスに従って設定した値 (1) を用いる。

⑩解離定数

信頼性の定まった情報源からは、解離定数に関する情報は得られなかったので、評価Ⅱでは ACD/Percepta 14.0.0 (Build 2726) の pKa GALAS Module から推計された値 (-2.9 (酸の解離定数), 2.7 (塩基の解離定数)) を用いる。

pKa=-2.9 (酸の解離定数), 2.7 (塩基の解離定数) であるため、水中では pH 7.0、pH 8.0、pH 9.0、pH 10.0 の全てにおいて酸性の基が解離かつ塩基性の基が非解離であると推定され、環境中では酸性の基が解離かつ塩基性の基が非解離として存在すると判断された。

¹ Meylan, W.M., Howard, P.H., Boethling, R.S. (1994) Upgrade of PCGEMS Water Solubility Estimation Method SRC-tR-94-009_F0144_108

1-4 分解性 (POSA)

下表にモデル推計に採用した POSA の分解に係るデータを示す。

表 1-7 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	73	AOPWIN (V.1.92) ²⁾ 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	15	BIOWIN(V.4.10) ²⁾ により推計された格付けより設定 ³⁾
		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	30	水中での生分解の半減期の 2 倍
		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	135	水中での生分解の半減期の 9 倍
		加水分解	NA	

1) 平成 28 年度第 1 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 9 月 13 日) で了承された値

2) EPI Suite(2012)

3) MHLW, METI, MOE(2014)

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 2.19×10^{-13} 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 73 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (73 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。また、機序別の半減期についても、加水分解及び光分解の反応に関する情報は得られなかった。

②-1 生分解の半減期

水中における生分解に関する測定値の情報は得られなかったため、BIOWIN (v.4.10) によ

308 り推計された Biowin3 の格付け「weeks」より、技術ガイダンスに従って設定した値 (15 日)
309 を評価Ⅱで用いる。
310 ③土壌
311 土壌中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかった。
312 ③-1 生分解の半減期
313 土壌での生分解半減期に係る情報は得られなかった。
314 評価Ⅱにおいては、技術ガイダンスに従って、水中での生分解の半減期の 2 倍の値 (30 日)
315 を用いる。
316
317 ④底質
318 底質中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかった。
319 ④-1 底質の半減期
320 底質での生分解半減期に係る情報は得られなかった。
321 評価Ⅱにおいては、技術ガイダンスに従って、水中での生分解の半減期の 9 倍の値 (135
322 日)を用いる。
323

1-5 物理化学的性状及び濃縮性（PSA）

下表にモデル推計に採用した PSA の物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。

表 1-8 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	—	159.16	—	—
融点	°C	246 ²⁾	測定値か推計値か不明	—
沸点	°C	325 ³⁾	MPBPWIN (v1.43) による推計値	—
蒸気圧	Pa	6.00×10^{-6} ³⁾	MPBPWIN (v1.43) による 20°C の推計値	—
水に対する溶解度	mg/L	(1×10^6) ³⁾	水と自由に混和 (WSKOWWIN (v1.42) による推計値及び WATERNT (v.1.01) による推計値より)	—
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	-2.846 ²⁾	測定値か推計値か不明	—
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	9.48×10^{-6} ³⁾	HENRYWIN (v3.20) による 20°C の推計値	—
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	0.509 ⁴⁾ （双性イオンの中性種） 16.9（アニオン種） 1.02（カチオン種） 16.9(pH=7.6~8.2 における値)	Franco らの推計式より	—
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	1.3	カテゴリーアプローチより ⁵⁾	—
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁵⁾	—
解離定数(pKa)	—	-6.0（酸） 1.8（塩基）	ACD/Percepta 14.0.0 (Build 2726)より算出 ⁶⁾	—

1) 平成 28 年度第 1 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 9 月 13 日）で了承された値。ただし、Koc の双性イオンの中性種以外の値は別途計算した。

2) Aldrich(2015)

3) EPI Suite(2012)

4) Franco ら(2008)

5) MHLW, METI, MOE(2014)

6) ACD/Labs(2014)

括弧内の値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

信頼性の定まった情報源から、測定値か推計値か不明であるが、244-249°C (Aldrich)のデータが得られた。そのデータの中央値 (246°C)を評価Ⅱで用いる。

②沸点

信頼性の定まった情報源からは、融点に関する情報は得られなかったもので、MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値(325°C)を評価Ⅱで用いる。

③蒸気圧

信頼性の定まった情報源からは、蒸気圧に関する情報は得られなかったもので、MPBPWIN

(v1.43) を用いた 20°Cの推計値 (6.00×10^{-6} Pa)を評価Ⅱで用いる。

④水に対する溶解度

信頼性の定まった情報源からは、水溶解度に関する情報は得られなかった。WSKOWWIN (v1.42) の推計値及び WATERNT (v1.01)の推計値が 1×10^6 mg/L を超えたため、 1×10^6 mg/L と推計された。EPI Suite では推計値を 1×10^6 mg/L を超えるものは水と自由に混和する (miscible)としている¹。これに従い、評価Ⅱでは参考値として推計値 (1×10^6 mg/L)を用いる。

⑤logPow

信頼性の定まった情報源から、測定値か推計値か不明であるが、-2.846 (Aldrich)のデータが得られたので、-2.846 を評価Ⅱで用いる。

⑥ヘンリー係数

信頼性の定まった情報源からは、ヘンリー係数に関する情報は得られなかったので、HENRYWIN (v3.20) を用いた 20°Cの推計値 (9.48×10^{-6})を評価Ⅱで用いる。

⑦Koc

信頼性の定まった情報源からは、Koc に関する情報は得られなかったので、Franco ら (2008)による Koc 推計式を用いた値 (0.509L/kg (双性イオンの中性種))を評価Ⅱで用いる。

⑧BCF

信頼性の定まった情報源からは、BCF に関する情報は得られなかったので、評価Ⅱでは NITE カテゴリーアプローチにより類推した値 (1.3) を用いる。

⑨BMF

信頼性の定まった情報源からは、BMF に関する情報は得られなかったので、評価Ⅱでは logPow (-2.846) 及び BCF (1.3 L/kg) から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。) に従って設定した値 (1) を用いる。

⑩解離定数

信頼性の定まった情報源からは、解離定数に関する情報は得られなかったので、評価Ⅱでは ACD/Percepta 14.0.0 (Build 2726)の pKa GALAS Module から推計された値 (-6.0 (酸の解離定数), 1.8 (塩基の解離定数))を用いる。

pKa=-6.0 (酸の解離定数), 1.8 (塩基の解離定数)であるため、水中では pH 7.0、pH 8.0、pH 9.0、pH 10.0 の全てにおいて酸性の基が解離かつ塩基性の基が非解離であると推定され、環境中では酸性の基が解離かつ塩基性の基が非解離として存在すると判断された。

¹ Meylan, W.M., Howard, P.H., Boethling, R.S. (1994) Upgrade of PCGEMS Water Solubility Estimation Method SRC-tR-94-009_F0144_108

1-6 分解性 (PSA)

下表にモデル推計に採用した PSA の分解に係るデータを示す。

表 1-9 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	73	AOPWIN (V.1.92) ²⁾ 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	15	BIOWIN (V.4.10) ²⁾ により推計された格付けより設定 ³⁾
		加水分解	NA	
		光分解	-	亜鉛ビリチオンと比べて非常に遅いが分解するという情報あり ⁴⁾
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	30	水中での生分解の半減期の 2 倍
		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	135	水中での生分解の半減期の 9 倍
		加水分解	NA	

1) 平成 28 年度第 1 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 9 月 13 日) で了承された値

2) EPI Suite(2012)

3) MHLW, METI, MOE(2014)

4) 千田ら(2005)

NA: 情報が得られなかったことを示す

-: 定量的な値は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 2.19×10^{-13} 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 73 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (73 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。また、機序別の半減期について

も、加水分解の反応に関する情報は得られなかった。

②-1 生分解の半減期

水中における生分解に関する測定値の情報は得られなかったため、BIOWIN(v.4.10)により推計された Biowin3 の格付け「weeks」より、技術ガイダンスに従って設定した値 (15 日) を評価Ⅱで用いる。

②-2 光分解の半減期

水中における光分解に関する測定値の情報は得られなかったが、定性的なデータとして、千田ら (2005)の論文によると、亜鉛ピリチオンの光分解試験において、PSA は亜鉛ピリチオンに比べて非常に遅いが分解すると記していた。

③土壌

土壌中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかった。

③-1 生分解の半減期

土壌での生分解半減期に係る情報は得られなかった。

評価Ⅱにおいては、技術ガイダンスに従って、水中での生分解の半減期の 2 倍の値 (30 日) を用いる。

④底質

底質中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかった。

④-1 底質の半減期

底質での生分解半減期に係る情報は得られなかった。

評価Ⅱにおいては、技術ガイダンスに従って、水中での生分解の半減期の 9 倍の値 (135 日)を用いる。

437 1-7 出典

- 438 ACD/Labs (2015): Advanced Chemistry Development, Inc. ACD/Percepta 14.0.0.
- 439 Aldrich (2015): 安全データシート, 2-Pyridinesulfonic acid(カタログ番号 661759),
440 <http://www.sigmaaldrich.com/safety-center.html>
- 441 EPI Suite (2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.
- 442 Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient
443 Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemistry, Environ. Toxicol. and
444 Chem., 27(10):1995-2004.
- 445 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.
446 <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2016-07-19 閲覧).
- 447 METI (2003a): METI. ビス (2-ピリジルチオ-N-オキシド) 亜鉛塩 (被検物質番号
448 K-1674) のカラム溶出法による水への溶解度測定. 既存化学物質点検, 2003.
- 449 METI (2003b): METI. ビス (2-メルカプトピリジン=N-オキシド) 亜鉛 (II) [別名: ビ
450 ス(2-ピリジルチオ-N-オキシド) 亜鉛塩] (被検物質番号 K-1674) のコイにおける濃縮
451 度試験. 既存化学物質点検, 2003.
- 452 METI (2003c): METI. ビス (2-ピリジルチオ-N-オキシド) 亜鉛塩 (試料 No.K-1674)
453 の融点測定 (金属ブロック付毛細管法). 既存化学物質点検, 2003.
- 454 METI (2003d): METI. ビス (2-ピリジルチオ-N-オキシド) 亜鉛塩 (被検物質番号
455 K-1674) の1-オクタノールと水との間の分配係数試験. 既存化学物質点検, 2003.
- 456 METI (2003e): ビス (2-ピリジルチオ-N-オキシド) 亜鉛塩 (被検物質番号 K-1674)
457 の分光光度法による水中における解離定数の測定. 既存化学物質点検, 2003.
- 458 METI (2003f): METI. ビス (2-ピリジルチオ-N-オキシド) 亜鉛塩 (試料 No.K-1674) の
459 蒸気圧測定 (気体流動法). 既存化学物質点検, 2003.
- 460 METI (2003g): ビス (2-メルカプトピリジン=N-オキシド) 亜鉛 (II)の微生物による分
461 解度試験, 2002.
- 462 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
463 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.
- 464 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2016-07-19 閲覧).
- 465 REACH (ECHA): ECHA. Information on Chemicals –Registered substances.
466 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>,
467 (2016-07-05 閲覧).
- 468 Sakkas et al. (2007): Sakkas, V.A., K. Shibata, Y. Yamaguchi, S. Sugawara, and T.
469 Albanis (2007) Aqueous phototransformation of Zinc Pyrithione: Degradation Kinetics
470 and Byproduct Identification by Liquid Chromatography–Atmospheric Pressure
471 Chemical Ionisation Mass Spectrometry, Journal of Chromatography A, 1144, 175–182.

472 SPARC (2011): ARChem. SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry: October
 473 2011 release w4.6.1691-s4.6.1687.

474 Turley et al. (2000): Turley, P. A., Fenn, R.J., Ritter, J.C. (2000) Pyrithiones as
 475 antifoulants: Environmental chemistry and preliminary risk assessment, Biofouling,
 476 15(1-3), 175-182.

477 US EPA (2004a): US EPA. Environmental Fate Science Chapter on Zinc Pyrithione (Zinc
 478 Omadine®) For Reregistration Eligibility Document (RED), 2004.
 479 [http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004](http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004-0147)
 480 [-0147](http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004-0147)
 481 ID: EPA-HQ-OPP-2004-0147-0013

482 US EPA (2004b): US EPA. Zinc Pyrithione Ecological Hazard and Environmental Risk
 483 Characterization Chapter for the Reregistration Eligibility Decision (RED) Document
 484 (D301371), 2004.
 485 [http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004](http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004-0147)
 486 [-0147](http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004-0147)
 487 ID: EPA-HQ-OPP-2004-0147-0011

488 Yamaguchi et al. (2009): YAMAGUCHI Yoshitaka, KOJIMA Ryuji, SENDA Tetsuya
 489 (National Maritime Res. Inst. Tokyo, JPN), KUMAKURA Akira, YAMADA Yasuhiro
 490 (Tokyo Univ. Sci., Tokyo, JPN), SHIBATA Kiyoshi (Chiba Inst. Technol., Chiba, JPN)
 491 (2009) Spectroscopic Study on Photolysis of Aqueous Solution of Zinc Pyrithione, Journal
 492 of Environmental Chemistry, 19(2), 207-213.

493 Zepp, R. G., & Cline, D. M. (1977) Rates of direct photolysis in aquatic environment.
 494 Environmental Science & Technology, 11(4), 359-366.

495 千田ら (2005): 千田哲也, 柴田清, 柴田俊明, 山口良隆, 宮田修, 菅沢忍, 高橋千織 (海上技
 496 術安全研), 森義明, 張野宏也 (大阪市環境科研) (2005) 船底塗料用防汚物質の海水中挙動に
 497 関する研究, 海上技術安全研究所報告, 第5巻, 第一号, 1-37.

498 山口ら (2005): 山口良隆, 柴田清, 千田哲也 (海上技術安全研), 張野宏也 (大阪市環境科研),
 499 山田康洋 (東京理大) (2005) 水環境中における船底防汚物質挙動の紫外可視吸収解析, 可視
 500 化情報学会誌, 25(1), 413-416.

501 山口ら (2008): 山口良隆, 菅澤忍, 千田哲也 (海上技術安全研), 張野宏也 (大阪市環境科研),
 502 柴田清 (千葉工大) (2008) 防汚物質の環境中における光分解及び加水分解, 海上技術安全研
 503 究所研究発表会講演集, Vol.8th, 301-302.

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
ATSDR	ATSDR(米国毒性物質疾病登録局):「Toxicological Profile」
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
CICAD	WHO/IPCS:「国際簡潔評価文書(CICAD)」
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
EHC	WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
EURAR	EU ECB(European Chemicals Bureau):「リスク評価書(EU Risk Assessment Report)」
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUPAC	The IUPAC Solubility Data Series
JCP	Japanチャレンジプログラム
Lange	Lange's Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 2005
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
Merck	The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
MOE初期評価	環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」
NITE初期リスク評価書	(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質の初期リスク評価書」
NITE有害性評価書	(財)化学物質評価研究機構・(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質有害性評価書」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry
USHPV	US/HPVチャレンジプログラム
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

基本情報

PACS F 等	139000
PACS Name 等	(T-4)-ビス[2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO]亜鉛(I I)
CASRN	13463-41-7
CA IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (T-4)-
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 CRC	融点	262 °C	262							2B	×	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
2 EPI Suite	融点	210.99 °C	210.99	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
3 HSDB	融点	240 °C	240							2B	×	×	decomposes		CHEMICAL/PHYSICA L PROPERTIES: > MELTING POINT:
4 PhysProp	融点	240 °C	240							2B	×	×			
5 REACH登録 情報	融点	267 °C	267	OECD TG 102	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○	純度98.7%	1977	Exp Key Melting point/freezing point.002
	融点	240 °C	240	OECD TG 102	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result		1A	×	×	純度97.9% Decomposition at 240°C	2002	Exp Key Melting point/freezing point.001
6 既存点検事 業	融点	236.1～ 240.7 ° C[被験物質 は融解とと もに褐色に 変化した。]	238.4	OECD TG 102	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	○	純度99.6%		

基本情報

PACS_F等	139000
PACS_Name等	(T-4)-ビス[2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO]亜鉛(11)
CASRN	13463-41-7
CA_IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (T-4)-
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	496.56 °C	496.56			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	○	○			
2 既存点検事 業	[室温～ 300°Cの間 に沸点は認 められな かった。]	単位換算不 可			OECD TG 103	yes (incl. certificat e)			experimental result		3	×	×			

基本情報

PACS_F 等	139000
PACS_Name 等	(T-4)-ビス〔2-(テオキソ-κS)-ピリジニ-1(2H)-オラト-κO〕亜鉛(1I)
CASRN	13463-41-7
CA_IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2-], (T-4)-
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	3.7E-009 Pa[2C以下の 値を用いて推定(4)]	3.70E-09	3.70E-09	20 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		4C	×	×			
2 REACH登録 情報	<0.000001 Pa	1.E-06	7.E-07	25 °C	OECD TG 104	yes	1: reliable without restriction	key study	experiment al result		1A	○	○		1997	Exp Key Vapour pressure.001
3 既存点検事業	<=0.00013 4 Pa	0.000134	4.11E-06	80 °C	OECD TG 104	yes (incl. certificat e)			experiment al result		4A	×	×			

基本情報

PACS_F 等	139000
PACS_Name 等	(T-4)-ビス〔2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO〕亜鉛(ⅠⅠ)
CASRN	13463-41-7
CA_IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (T-4)-
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	128 mg/L[2B 以上の値を 用いて推定 (2C)]	128	119.488824	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 REACH登録 情報	6.3 ppm	6.3	6.3	20 °C		7 OECD TG 105	yes	1: reliable without restriction	key study			1A	○	○		1997	Exp Key Water solubility.001
3 既存点検事 業	3.97±0.119 mg/L	3.97	3.97	20±0.5 °C		OECD TG 105	yes (incl. certificat e)			experiment al result		1A	○	○			

基本情報

PACS_F 等	139000
PACS_Name 等	(T-4)-ビス [2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1 (2H)-オラト-κO] 亜鉛 (1:1)
CASRN	13463-41-7
CA_IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (T-4)-
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	-1.99	-1.99			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2	REACH登録 情報	0.9	0.9	25 °C	7.5~ 7.7[7.5 < 7.7]	OECD TG 107	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		1992	Exp Key Partition coefficient.001
3	既存点検事業	1.01± 0.007	1.01	25.2 °C	6.3~6.5	OECD TG 107				experimental result		1B	×	○			

基本情報

PACS_F等	139000
PACS_Name等	(T-4)-ビス〔2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO〕亜鉛(I I)
CASRN	13463-41-7
CA-IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS]-, (T-4)-
その他番号	
その他名称	

◀ 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Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	59.66 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定(2C)]	60				KOCWIN				(Q)SAR		2C	○	×			
2 U.S.EPA	Koc	2347	2347				EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-1				experimental result			×	○	Marbleheadの塩類土壌	U.S.EPA. Environmental Fate Science Chapter on Zinc Pyrrithione (Zinc Omadine®) For Reregistration Eligibility Document (RED), 2004.	p.10: 5. Adsorption/Desorption in soils/sediments (Guideline #: 163-1, MRID#:440104-02)
3 U.S.EPA	Koc	10633	10633				EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-1				experimental result			×	○	Marbleheadの塩類底質	U.S.EPA. Environmental Fate Science Chapter on Zinc Pyrrithione (Zinc Omadine®) For Reregistration Eligibility Document (RED), 2004.	p.10: 5. Adsorption/Desorption in soils/sediments (Guideline #: 163-1, MRID#:440104-02)
4 U.S.EPA	Koc	784	784				EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-1				experimental result			×	○	Portlandの淡水土壌	U.S.EPA. Environmental Fate Science Chapter on Zinc Pyrrithione (Zinc Omadine®) For Reregistration Eligibility Document (RED), 2004.	p.10: 5. Adsorption/Desorption in soils/sediments (Guideline #: 163-1, MRID#:440104-02)
5 U.S.EPA	Koc	3597	3597				EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-1				experimental result			×	○	Portlandの淡水底質	U.S.EPA. Environmental Fate Science Chapter on Zinc Pyrrithione (Zinc Omadine®) For Reregistration Eligibility Document (RED), 2004.	p.10: 5. Adsorption/Desorption in soils/sediments (Guideline #: 163-1, MRID#:440104-02)

基本情報

PACS_F 等	139000
PACS_Name 等	(T-4)-ビス〔2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO〕亜鉛(1:1)
CASRN	13463-41-7
CA_IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (T-4)-
その他番号	
その他名称	

▲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Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	6.02E-017 Pa・ m ³ /mol	6.02E-17					(Q)SAR		3	×	×			
2 REACH登録情 報	<0.00005 Pa・ m ³ /mol	0.00005			1: reliable without restriction	key study	estimated by calculation		4C	○	×			Calc Key Henry's Law constant.001
3 Henry計算式		4E-05					estimated by calculation	H=VP/(WS/MW)			○	VP(7×10 ⁻⁷), WS(5.1), MW(317.7)を用 いて計算		

基本情報

PACS F 等	139000
PACS Name 等	(T-4)-ビス〔2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO〕亜鉛 (11)
CASRN	13463-41-7
CA IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (1-4)-
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		3.162 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C) 1	3.162	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 REACH登録情 報		1	0.05 µg/L		BCF	定常状態	8.28	8.28	OECD TG 305E	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×	暴露期間30日 排泄期間75日	2001	Exp Key Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
3		2	0.5 µg/L		BCF	定常状態	7.87	7.87	OECD TG 305E	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×	暴露期間30日 排泄期間75日	2001	Exp Key Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
4 既存点検事業	-	2	0.1 µg/L		BCF	定常状態	200	200	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	○	○	-		K1674
5	-	2	0.1 µg/L	2 週	Rawデータ	-	61	61	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
6	-	2	0.1 µg/L	2 週	Rawデータ	-	69	69	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
7	-	2	0.1 µg/L	4 週	Rawデータ	-	150	150	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
8	-	2	0.1 µg/L	4 週	Rawデータ	-	140	140	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
9	-	2	0.1 µg/L	6 週	Rawデータ	-	210	210	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
10	-	2	0.1 µg/L	6 週	Rawデータ	-	190	190	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
11	-	2	0.1 µg/L	7 週	Rawデータ	-	170	170	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
12	-	2	0.1 µg/L	7 週	Rawデータ	-	180	180	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
13	-	2	0.1 µg/L	60 日	Rawデータ	-	180	180	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
14	-	2	0.1 µg/L	60 日	Rawデータ	-	240	240	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
15	-	1	1 µg/L		BCF	定常状態	160	160	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
16	-	2	0.1 µg/L	2 週	Rawデータ	-	55	55	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
17	-	2	0.1 µg/L	2 週	Rawデータ	-	52	52	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
18	-	2	0.1 µg/L	4 週	Rawデータ	-	160	160	化審法TG	yes	-	-	experimental	-	1A	×	×	-		K1674
19	-	2	0.1 µg/L	4 週	Rawデータ	-	150	150	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
20	-	2	0.1 µg/L	6 週	Rawデータ	-	160	160	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
21	-	2	0.1 µg/L	6 週	Rawデータ	-	170	170	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
22	-	2	0.1 µg/L	7 週	Rawデータ	-	130	130	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
23	-	2	0.1 µg/L	7 週	Rawデータ	-	120	120	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
24	-	2	0.1 µg/L	60 日	Rawデータ	-	160	160	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674
25	-	2	0.1 µg/L	60 日	Rawデータ	-	180	180	化審法TG	yes	-	-	experimental result	-	1A	×	×	-		K1674

基本情報

PACS_F 等	139000
PACS_Name 等	(T-4)-ビス〔2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO〕亜鉛(1I)
CASRN	13463-41-7
CA_IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (T-4)-
その他番号	
その他名称	

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	キースタディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 既存点検事業	pKa	[解離状態の 244及び 282nmの球高 度がpHに依存 しないことか ら、被験物質 の水中におけ る解離定数に ついて知見を 得ることは困 難であった。]	算出不可			OECD TG 112				experimental result					

基本情報

PACS F等	139000
PACS Name等	(T-4)-ビス[2-(チオキソ-κS)-ピリジニ-1(2H)-オラト-κO]亜鉛(1:1)
CASRN	13463-41-7
CA IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (1-4)-
その他番号	
その他名称	

▲ 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	キースタディー該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	大気	OHラジカル との反応		4.77×10^{-12} cm ³ /molecule/sec	5×10^5 molecule/cm ³			3.4	25℃		AOPWIN					(Q)SAR		○			
2 U.S.EPA	水中	生分解				0.065時間		0.0027			EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-4					experimen tal result		×	好気性、海水: Marble Headの Little Harbor		p.6:3. Aerobic Aquatic Metabolism (Guideline #: 162-4, MRID#: 440104-01)
3 U.S.EPA	水中	生分解				1.3時間		0.054			EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-4					experimen tal result		×	好気性、淡水: Portlandの Connecticut River		p.6:3. Aerobic Aquatic Metabolism (Guideline #: 162-4, MRID#: 440104-01)
4 U.S.EPA	水中	生分解				365時間		15.2			EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-4					experimen tal result		○	好気性、海水: Marble Headの Little Harbor		p.6:3. Aerobic Aquatic Metabolism (Guideline #: 162-4, MRID#: 440104-01)
5 U.S.EPA	水中	生分解				298時間		12.4			EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-4					experimen tal result		×	好気性、淡水: Portlandの Connecticut River		p.6:3. Aerobic Aquatic Metabolism (Guideline #: 162-4, MRID#: 440104-01)
6 既存点検事業	水中	生分解					0%、0% (BOD分解 度、HPLC分 離度)				化審法TG		yes			experimen tal result		×			
7 U.S.EPA	水中	加水分解				99日		99	25±1℃	5	EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-1					experimen tal result		×	暗室、滅菌した緩 衝液		p.3:1. Hydrolysis (Guideline number: 161-1, MRID #:438646- 02)
8 U.S.EPA	水中	加水分解				120日		120	25±1℃	7	EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-1					experimen tal result		×	暗室、滅菌した緩 衝液		p.3:1. Hydrolysis (Guideline number: 161-1, MRID #:438646- 02)
9 U.S.EPA	水中	加水分解				123日		123	25±1℃	9	EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-1					experimen tal result		○	暗室、滅菌した緩 衝液		p.3:1. Hydrolysis (Guideline number: 161-1, MRID #:438646- 02)
10 U.S.EPA	水中	加水分解				96日		96	25±1℃	8.2	EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-1					experimen tal result		×	模擬海水		p.3:1. Hydrolysis (Guideline number: 161-1, MRID #:438646- 02)
11 YAMAGUCHI, et al.	水中	光分解				25分		0.017								experimen tal result		○	・純水、キセノンラ ンプ、光強度と反応 速度定数が比例す るとして188W/m ² の 半減期算出。 ・更にを水中での光 透過率等を考慮し て補正すると0.14日 (200分)になる		①YAMAGUCHI Yoshitaka, KOJIMA Ryuji, SENDA Tetsuya, KUMAKURA Akira, YAMADA Yasuhiro, SHIBATA Kiyoshi (2009) Spectroscopic Study on Photolysis of Aqueous Solution of Zinc Pyrrhione. Journal of Environmental Chemistry, 19(2), 207-213.
12 Turley et al.	水中	光分解				17.5日		0.012								experimen tal result		×	人工海水、キセノン ランプ、154W/m ²		Turley, P. A., Fenn, R.J., Ritter, J.C. (2000) Pyrrhiones as antifoulants: Environmental chemistry and preliminary risk assessment, Biofouling, 15(1-3), 175-182.
13 Turley et al.	水中	光分解				2分未満		0.0014								experimen tal result		×	人工海水、太陽 光、屋外、9月、北 緯42度		Turley, P. A., Fenn, R.J., Ritter, J.C. (2000) Pyrrhiones as antifoulants: Environmental chemistry and preliminary risk assessment, Biofouling, 15(1-3), 175-182.

基本情報

PACS F 等	139000
PACS Name 等	(T-4)-ビス〔2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO〕亜鉛(1:1)
CASRN	13463-41-7
CA IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (1-4)-
その他番号	
その他名称	

▲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	キースタディー該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
14 U.S.EPA	水中	光分解				17分		0.012			EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-2					experimen tal result		x	緩衝液、キセノンラ ンプ、154.5W/m ²		p.4:2. Photolysis in Water (Guideline number 161-2, MRID #: 440115-01)
15 U.S.EPA	底質	生分解				0.89日		0.89			EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-4					experimen tal result		x	好気性、海水: saltwater harbor used as a boat maintenance site		p.7:3a. Supplemental Aerobic Aquatic Metabolism (162-4, MRID#: 448500-04)
16 U.S.EPA	底質	生分解				13.1時間		0.55			EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-3 (試験番号はREACH登録情 報で確認)					experimen tal result		○	嫌気性、淡水及び 海水: Portlandの Connecticut River		p.9:4a. Supplemental Anaerobic Aquatic Metabolism of Zinc Pyrrithione in Marine Water and Sediment (MRID#: 448500-02)
17 U.S.EPA	底質	生分解				18.9時間		0.79			EPA Subdivision N Pesticide Guideline No. 162-3 (試験番号はREACH登録情 報で確認)					experimen tal result		○	嫌気性、海水: Marble Headの Little Harbor		p.9:4a. Supplemental Anaerobic Aquatic Metabolism of Zinc Pyrrithione in Marine Water and Sediment (MRID#: 448500-02)

基本情報

PACS F 等	139000
PACS Name 等	(T-4)-ビス[2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO]亜鉛(11)
CASRN	13463-41-7
CA IN	Zinc, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-, (T-4)-
その他番号	
その他名称	

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	値の詳細	備考	文献	ページ番号等
1	REACH登録情報		39%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	key study				2002	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
2			18%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	key study				2002	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
3			63%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.002
4			73%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.002
5			0%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.004
6			9%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.004
7			24%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.004
8			29%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.004
9			77%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.004
10			17%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			1998	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.005
11			54%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			1998	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.005
12	既存点検事業		0%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
13			0%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
14			0%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
15			0%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
16			0%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
17			0%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				

基本情報

優先通し番号	139007
物質名称	2-スルホビリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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	142.37 °C	142.37	MPBPWIN				(Q)SAR	Weighted Value		○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139007
物質名称	2-スルホビリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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	378.83 °C	378.83			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method		○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139007
物質名称	2-スルホピリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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	2.74E- 006Pa	2.74E-06	2.74E-06	20℃	MPBPWIN				(Q)SAR	Modified Grain method		○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139007
物質名称	2-スルホポリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	1E+06	1E+06	1E+06	25℃		WSKOWWIN				(Q)SAR			○			
2	EPI Suite	1E+06	1E+06	1E+06	25℃		WATERNT				(Q)SAR			○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139007
物質名称	2-スルホピリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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 ギースタディ 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 るギースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	-4.49	-4.49			KOWWIN				(Q)SAR	KowWin set		×	遊離種の中性種の値		
2	EPI Suite	-5.35	-5.35			KOWWIN				(Q)SAR	KowWin set		○	双性イオンの中性種の値		

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139007
物質名称	2-スルホポリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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 ディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	10L/kg	10				MCI				(Q)SAR			×			
2 EPI Suite	Koc	0.04149L/kg	0.04149				LogKow				(Q)SAR			×			
3 Franco's (2008)	Koc	0.0767L/kg	0.0767											○	中性化学種での値	Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil- Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemistry, Environ. Toxicol. and Chem., 27(10):1995-2004.	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139007
物質名称	2-スルホビリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

▲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	9.48E-011 Pa・ m ³ /mol	9.48E-011 Pa・ m ³ /mol	20°C				(Q)SAR	Bond Estimation Method		○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139007
物質名称	2-スルホピリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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 Labs	pKa	-2.9(Acid), 2.7(Base)				GALAS Module				(Q)SAR		○			
2	ACD Labs	pKa	-0.6(Base)				Classic Module				(Q)SAR		×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139007
物質名称	2-スルホピリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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	値の詳細	備考	文献	ページ番号等
------	-----	-----	------	-------	-------	-----	-------------	------------------	------	------	----	----	--------

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139007
物質名称	2-スルホピリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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 の該当	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		1			BCF		3.16L/kg	3.16	BCFBAFWIN				Q/SAR			×			
2 NITEカテゴリ アプローチ							1.3 L/kg	1.3					評価Ⅱでカテゴ リーアプローチ			○	他物質から類推した値		

基本情報

優先通し番号	139007
物質名称	2-スルホピリジン=1-オキシド
CAS番号	28789-68-6

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	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	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	大気	OHラジカルとの反応		0.2191E-12 cm^3/molec ule/sec				25 °C		AOPWIN					(Q)SAR		○			
2	EPI Suite	水域	生分解								BIOWIN	Weeks				(Q)SAR	Biowin3 Ultimate Biodegradation	○			

基本情報

優先通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

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	Aldrich	融点	244~249 °C	246.5					-			○		安全データシート, 2-Pyridinesulfonic acid(カタログ番号 661759)	p4
2	EPI Suite	融点	102.46 °C	102.46	MPBPWIN				(Q)SAR	Weighted Value		×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

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	324.88 °C	324.88			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method		○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

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	6.00E-06	6.00E-06	6.00E-06	20	MPBPWIN				(Q)SAR	Modified Grain method		○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

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IIにお けるキース タデー	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	1E+06	1E+06	1E+06	25℃		WSKOWWIN				(Q)SAR			○			
2	EPI Suite	1E+06	1E+06	1E+06	25℃		WATERNT				(Q)SAR			○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

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	-4.8711	-4.8711			KOWWIN				(Q)SAR			×	双性イオンの中性種を計算		
	EPI Suite	-2.3535	-2.3535			KOWWIN				(Q)SAR			×	遊離種の中性種を計算		
2	Aldrich	-2.846	-2.846										○		安全データシート, 2-Pyridinesulfonic acid(カタログ番号 661759)	p5

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

▲ 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 ディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	10L/kg	10				MCI				(Q)SAR			×	遊離種の中性種の値		
2 EPI Suite	Koc	0.6333L/kg	0.6333				LogKow				(Q)SAR			×	遊離種の中性種の値		
3 Franco's (2008)	Koc	0.509L/kg	0.509											○	中性化学種での値	Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil- Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemistry, Environ. Toxicol. and Chem., 27(10):1995-2004.	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

▲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	9.48E-006 Pa・ m ³ /mol	0.00000948					(Q)SAR	Bond Estimation Method		○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139006	
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸	
CAS番号	15103-48-7	

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	SPARC	pKa	0.43(Acid), 1.71(Base)				SPARC				(Q)SAR	SPARC	×			
2	ACD Labs	pKa	-6.0(Acid), 1.8(Base)				GALAS Module				(Q)SAR		○			
3	ACD Labs	pKa	-2.9(Acid), 1.7(Base)				Classic Module				(Q)SAR		×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

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
------	-----	-----	------	-------	-------	-----	-------------	------------------	------	---------	----	----	--------

基本情報

優先評価化学物質通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

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 の該当	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		1			BCF		3.16L/kg	3.16	BCFBAFWIN				(Q)SAR			×			
2	NITEカテゴリー アプローチ							1.3 L/kg	1.3					評価Ⅱでカテゴ リーアプローチ			○	他物質から類推した値		

基本情報

優先通し番号	139006
物質名称	ピリジン-2-スルホン酸
CAS番号	15103-48-7

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	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	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		0.2191E-12 cm^3/molecule/sec				25 °C		AOPWIN					(Q)SAR				
2 EPI Suite	水域	生分解								BIOWIN	Weeks				(Q)SAR	Biowin3 Ultimate Biodegradation			