

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13

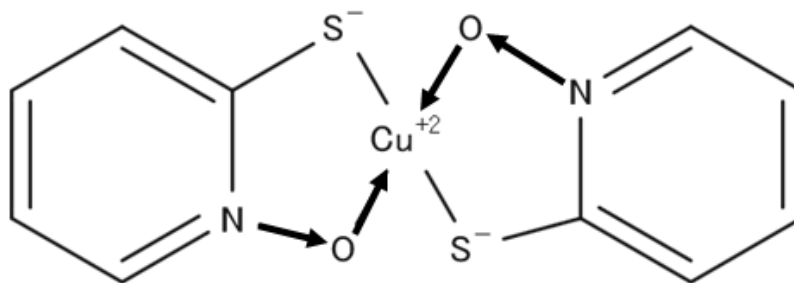
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅

優先評価化学物質通し番号 84



14
15
16
17
18
19
20

平成 30 年 3 月

経済産業省

21

目 次

22	1 評価対象物質の性状	1
23	1-1 評価対象物質の設定	1
24	1-2 物理化学的性状及び濃縮性（銅ピリチオン）	5
25	1-3 分解性（銅ピリチオン）	9
26	1-4 物理化学的性状及び濃縮性（POSA）	13
27	1-5 分解性（POSA）	14
28	1-6 物理化学的性状及び濃縮性（PSA）	15
29	1-7 分解性（PSA）	16
30	1-8 出典	17
31		

32 1 評価対象物質の性状

33 1-1 評価対象物質の設定

34 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
35 を示す。

36 ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅(以下、銅ピリチオン)は水中で光分解・加水分解・生
37 分解によって速やかに変化することが知られているため、水中で生じる変化物の種類を調査した。
38 優先評価化学物質 139 (T-4)-ビス[2-(チオキソ-κS)-ピリジン-1(2H)-オラト-κO]
39 亜鉛(II)(以下、亜鉛ピリチオン)の物理化学的性状等の詳細資料(METI (2017))で使用された各
40 種文献を参考として利用し、銅ピリチオンに関する光分解・加水分解・生分解に関するデータに関
41 しては、欧州殺生物性製品規則(BPR)の下で利用された評価報告書(ECHA (2015))並びに試験
42 データ(ECHA (2010b)及び ECHA (2014b))、米国連邦殺虫剤殺菌剤殺鼠剤法(FIFRA)の下で利
43 用された関連文書(U.S. EPA (2010)、U.S. EPA (2012))、及び、千田ら(2005)を調査対象とした。

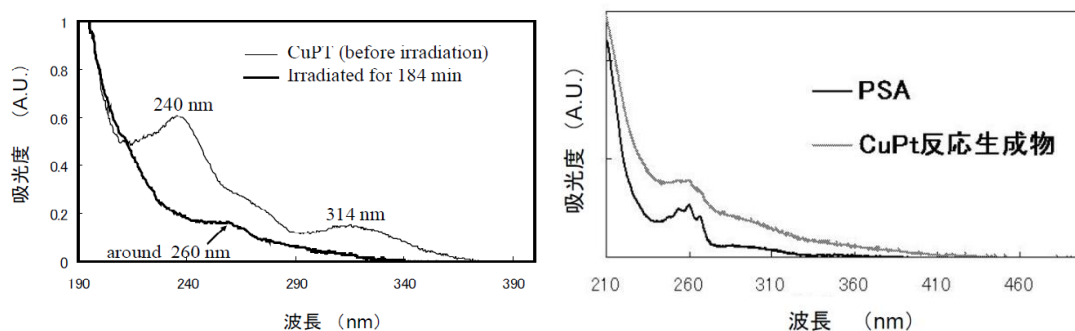
44 亜鉛ピリチオンの評価対象物質を選定するに当たって、METI (2017)では、山口ら (2008)及び
45 Sakkas et al. (2007)、U.S. EPA (2004a、b)の文献を参考にしており、光分解変化物である 2,2'-ジチ
46 オビスピリジン((PS)2)、2,2'-ジチオビスピリジンモノ N-オキシド(PT-PS)、2,2'-ジチオビスピリジン-N-
47 オキシド((PT)2)は短時間で光分解すること、2-メルカプトピリジン-N-オキシド(HPS)及びピリジン-N-
48 オキシド(PO)の生成量が他の光分解産物と比較して非常に少ないこと、米国 FIFRA において主要
49 な変化物としてピリジン-N-オキシド-2-スルホン酸(POSA)及び 2-ピリジンスルホン酸(PSA)の 2 物質
50 を評価対象物質として選んでいることから、亜鉛ピリチオンの他に、POSA と PSA を評価対象物質
51 として選定している。

52 ECHA (2015)では、光分解によりピリジン-2-スルフィン酸(PSiA)及び PSA が生成すると報告され
53 ている。PSiA は光照射の 1 時間後に最大濃度となり、銅ピリチオンの 44%が PSiA となるのに対
54 し、PSA は 14 日後に最大濃度となり、銅ピリチオンの 74%が PSA となることから、光分解による最
55 最終的な変化物は PSA としている。海水及び海の底質を利用した生分解試験においても、多くの変
56 化物が生成するが、半減期が非常に短く、最終的に PSA が生成するとしている。なお、ナトリウムピ
57 リチオンの易分解性試験(OECD TG 301B)においても、PSA が生成するという報告がされている。
58 加水分解に関して、銅ピリチオンが高濃度の場合安定であり、低濃度でも加水分解による半減期
59 は非常に遅いとしている。以上の情報により、ECHA (2015)では、銅ピリチオンの他、最終変化物
60 である PSA についても、評価対象物質としている。

61 U.S. EPA (2010)では、加水分解における主な変化物として(PT)2 及び 2-スルフィノピリジン=1-
62 オキシド(POSiA)が報告されているが、(PT)2 は pH9.0 の試験のみ報告があり、また、試験 7 日目
63 で最大濃度となり、銅ピリチオンの 10%が(PT)2 となるが、その後減少し、30 日後には銅ピリチオン
64 の 0.6%が(PT)2 となる。一方、POSiA は pH7.0、9.0、人工海水(pH 8.2)における試験で報告され
65 ており、また、試験終了日の 30 日目で最大濃度となることが報告されている(pH 7.0: 13%、pH 9.0:

66 69%、人工海水: 61%)。光分解における変化物としては、PSiA 及び PSA が報告されており、人工
67 海水においては、PSiA は試験 6 時間で最大値をとり、銅ピリチオンの 38%が PSiA となるが、その
68 後減少し、17 日後には PSiA は検出されない。一方で、PSA は試験最終日の 17 日目で最大値と
69 なり、銅ピリチオンの 36%が PSA となる。生分解における主な変化物としては、POSA 及び PSA が
70 報告されている。なお、U.S.EPA (2012)では、主な変化物である POSA 及び PSA の有害性情報を
71 収集している。

72 千田ら(2005)においても、銅ピリチオンの光分解(太陽光)による変化物の報告が行われている。
73 図 1-1 で示した図は、千田ら(2005)において銅ピリチオンの光分解産物を同定するために使
74 われたグラフである。銅ピリチオン水溶液を太陽光に 184 分間 露光したスペクトルを確認すると、
75 銅ピリチオンに特徴的なピークは消滅し、260 nm 近辺に吸収を持つスペクトルが得られた。さらに、
76 銅ピリチオンの分解物と PSA とが 260nm 付近の吸収ピーク位置が一致しており、紫外可視吸収
77 スペクトルの観点からは PSA が銅ピリチオンの主要な光分解生成物である(千田ら(2005))。



78

79 図 1-1 千田ら(2005)における銅ピリチオンの光分解産物の同定結果

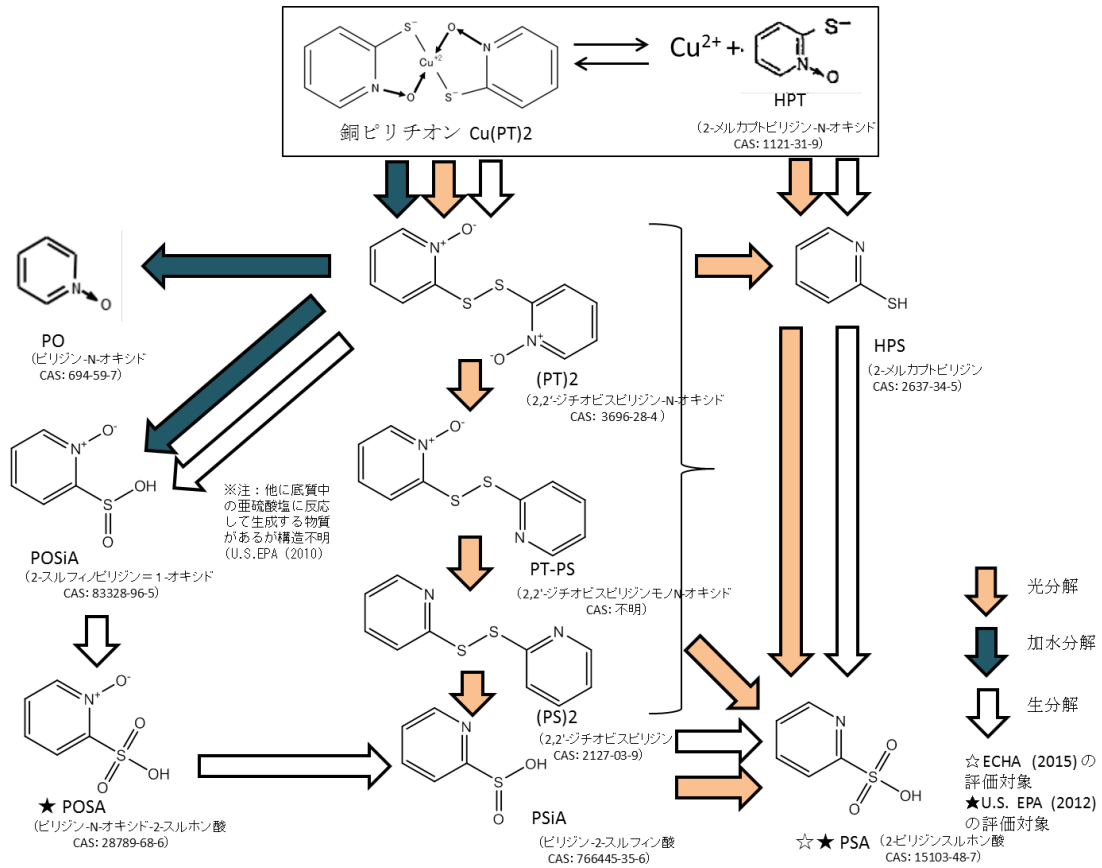
80

81 上述した銅ピリチオンの変化物の生成経路を図 1-2 のとおり、整理した¹。以上の情報を考
82 慮し、本評価においては親物質である銅ピリチオン(表 1-1)の他、主要な変化物である POSA
83 (表 1-2)と PSA(表 1-3 評価対象物質(変化物2))の3物質を評価対象物質とする²。以降
84 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。

85

¹ U.S. EPA (2010)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。

² 銅については、CERI (2002)において環境分布・モニタリングデータの情報が記載されており、河川水中濃度 0.3 µg/L、海水中濃度 3 µg/L との報告が記載されている。化審法製造・輸入数量等届出より、河川水中濃度については PRAS-NITE、海水中濃度については MAMPEC で計算したところ、それぞれの最大値は 3.1×10^{-2} µg/L、 5.9×10^{-1} µg/L となり、CERI (2002)に記載された河川水中濃度及び海水中濃度を下回る。また、水質汚濁防止法における排水基準が 1 日平均 3 mg/L と設定されている。銅ピリチオン由来の銅について、化審法製造・輸入数量等届出より出荷先別詳細用途別の最大排出量が 2.62 kg/年であり、1 日平均の排出量が 7,165 mg/日となる。水質汚濁防止法の適用について、1 日当たりの平均的な排水の量が 50 立方メートル以上である工場又は事業場に係る排水水であることから、前述の 7,165 mg/日を 50 m³ で除すると、最大排出量の事業者における排水水中の銅ピリチオン由来の銅イオン濃度が 0.14 mg/L となり、排水基準 3 mg/L を下回ることから、精査の対象外とした。



86

87

88

89

図 1-2 銅ピリチオンの変化物と生成する経路¹

表 1-1 評価対象物質 (親物質)

評価対象物質名称	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
分子式	$\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_2\text{S}_2\text{Cu}$
CAS 登録番号	14915-37-8

90

91

¹ Lofts et al. (2009) によると 錯体の安定度定数は次のとおり。

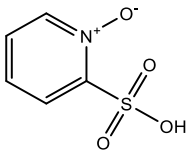
$$\text{Cu}^{2+} + \text{PT}^- \rightleftharpoons \text{CuPT}^+ \quad \text{錯体の逐次安定度定数 } \beta_0^1 : \log \beta_0^1 = 10.6$$

$$\text{CuPT}^+ + \text{PT}^- \rightleftharpoons \text{Cu}(\text{PT})_2 \quad \text{錯体の逐次安定度定数 } \beta_0^2 : \log \beta_0^2 = 8.2$$

これから、 $\text{CuPT}^+ + \text{PT}^- \rightleftharpoons \text{Cu}(\text{PT})_2$ 錯体安定度定数 $\beta : \log \beta = \log \beta_0^1 + \log \beta_0^2 = 18.8$ と計算される

92

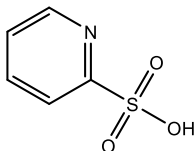
表 1-2 評価対象物質 (変化物 1)

	
評価対象物質名称	ピリジン-N-オキソド-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

93

94

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

95

96

97 1-2 物理化学的性状及び濃縮性（銅ピリチオン）

98 下表にモデル推計に採用した銅ピリチオンの物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。
 99 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。

100
 101

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	—	315.87	—	315.87
融点	°C	<u>(276)</u> ⁴⁾	測定値の中央値	194 ¹⁾
沸点	°C	— ^{4,5)}	280°Cで完全に分解	461 ¹⁾
蒸気圧	Pa	<u><3.5 × 10⁻⁷</u> ^{4),5)}	気体飽和法による 25°Cでの測定値を 20°Cに換算した値	4.1 × 10 ⁻⁷ ¹⁾
水に対する溶解度	mg/L	<u>0.060</u> ^{4),5)}	20°Cにおける測定値	1.5 × 10 ⁴ ¹⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	<u>2.44</u> ^{4),5)}	21°C、pH 7.0における測定値(純度 99%)	-0.61 ¹⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>1.8 × 10⁻³</u> ⁶⁾	蒸気圧と水溶解度から算出した推計値	2.5 × 10 ⁻³ ²⁾
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>5,528</u> ⁷⁾	塩類土壌における測定値	3.2 ¹⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>7.7</u> ⁴⁾	OECD TG 305Cにおける測定値	50 ³⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁶⁾	1
解離定数(pKa)	—	—	酸もしくは塩基となる官能基を持たないとの記載あり ⁴⁾	— ⁸⁾

102
 103
 104
 105
 106
 107
 108
 109
 110

※平成 29 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 29 年 9 月 11 日）で了承された値

- | | |
|---------------------|---------------------------|
| 1) EPI-Suite (2012) | 6) MHLW, METI, MOE (2014) |
| 2) PhysProp (2017) | 7) U. S. EPA (2010) |
| 3) MITI (1996) | 8) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない |
| 4) ECHA (2015) | -:値を設定しないことを示す |
| 5) U. S. EPA (2008) | 括弧内の値は参考値であることを示す |

111 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

112 ①融点

113 評価Ⅰでは、MPBPWIN (v1.43) による推計値(194°C)を用いた。ECHA (2015)には、273-
 114 279°Cで融解中に分解するとの記載があった。また、U.S. EPA (2008)には、GLP 適合施設
 115 において EPA テストガイドライン (OPPTS 830.7200) に準拠した試験方法で測定された
 116 結果が記載されており、271°Cにて炭化が始まり、278°Cで結晶構造の崩壊、279°Cにおいて
 117 液状となり始め、280°Cで完全に分解すると記されていた。275°C付近で分解が始まること
 118 から、評価Ⅱにおいては、ECHA (2015)に記された中央値である 276°Cを参考値として用い
 119 る。

120
 121

②沸点

122 評価Ⅰで採用した値は、MPBPWIN (v1.43)により推計された値 (461°C) である。①融点

123 で述べたとおり、銅ピリチオンは 280°C 付近で完全に分解することから、評価Ⅱにおいては
124 沸点を設定しない。

125

126 ③蒸気圧

127 評価Ⅰで採用した値は、MPBPWIN (v1.43)により推計された 25°Cでの値 (5.75×10^{-7} Pa)
128 を 20°Cでの値に補正したもの (4.1×10^{-7} Pa)である。ECHA (2015)及び ECHA (2010a)に
129 は、GLP 適合施設で実施された欧州テストガイドライン(EC A.4)に準拠した試験方法(滲出
130 法：蒸気圧天秤)により、190-210°Cで測定した値を 25°Cでの値に補正した値(4.3×10^{-7} Pa)
131 が記載されていた。ただし、190-210°Cにおける測定値の記載はなかった。同様に、AIST
132 (2007)においても、25°Cにおける値として 4.3×10^{-7} Pa が記されていた。また、ECHA (2015)
133 及び EPA (2008)には、GLP 適合施設で実施された EPA テストガイドライン(OPPTS
134 830.7950)に準拠した試験方法(気体飽和法)による、25°Cにおける測定値($<5 \times 10^{-7}$ Pa)が記載
135 されていた。滲出法：蒸気圧天秤による値は、190-210°Cで測定された値を 25°Cでの値に補
136 正した値であることから信頼性は低いと判断し、評価Ⅱにおいては、気体飽和法により測定
137 された 25°Cでの値 ($<5 \times 10^{-7}$ Pa)を 20°Cでの値に補正した値 (3.5×10^{-7} Pa)を用いる。

138 ④水に対する溶解度

139 評価Ⅰで採用した値は、WSKOWWIN (v1.42)により推計された 25°Cでの値(16,200
140 mg/L)を 20°Cでの値に補正した値 (15,122 mg/L)である。ECHA (2015)及び EPA (2008)に
141 は、GLP 適合施設における EPA テストガイドライン(OPPTS 830.7840/ 830.7860)に準拠
142 した試験方法(カラム溶出法)による、純水に対する、10°C、20°C30°Cにおける測定値(0.049
143 mg/L、0.060 mg/L、0.15 mg/L)が記載されていた。WSKOWWIN (v1.42)では、芳香環を構
144 成している窒素原子を第 3 級アミンのフラグメントとして認識していたため、
145 WSKOWWIN (v1.42)における推計値は、実際の溶解度よりも大きい値として推計されたと
146 考える。評価Ⅱにおいては、ECHA (2015)及び EPA (2008)で採用された 20°Cにおける値
147 (0.060 mg/L) を用いる。

148 なお、千田ら(2005)においては、亜鉛ピリチオン及び銅ピリチオンの飽和水溶液を作製し
149 ており、それぞれ最大で 4.3 mg/L 及び 0.24 mg/L であったとの記載があった。その作製方
150 法は、純水に対して重量比で 1/1000 の亜鉛ピリチオン、銅ピリチオンを加えて攪拌及び超
151 音波を利用して溶解させた後、0.45 μm のメンブランフィルターで未溶解の亜鉛ピリチオ
152 ン、銅ピリチオンを除去しそれぞれの飽和溶液を作製しており、濃度の決定に関しては、原
153 子吸光法による亜鉛、銅の定量分析から亜鉛ピリチオン、銅ピリチオンに換算することで、
154 それぞれの飽和水溶液の濃度を決定している。これは、今回採用した銅ピリチオンの水溶解
155 度(0.060 mg/L)が METI (2017)において採用された亜鉛ピリチオンの水溶解度値 (5.1
156 mg/L) よりも低いことと一致している。

157

158 ⑤logPow

159 評価Ⅰで採用した値は、KOWWIN (v1.68)を用いた推計値 (-0.61) である。EPA (2008)
160 には、GLP 適合施設で実施された EPA テストガイドライン(OPPTS 830.7550)に準拠した
161 試験方法(フラスコ振とう法)による測定値(2.44)が記載されており、ECHA (2015)にも同じ
162 く、pH 7.0、21℃における測定値(2.44)が記載されていた。また、ECHA (2015)及び ECHA
163 (2010)には、GLP 適合施設で実施された欧州テストガイドライン(EC A.8)に準拠した試験
164 方法 (フラスコ振とう法)による、pH 5.8-6.1、22.5℃における測定値(2.84)が記載されてお
165 り、AIST (2007)にも試験法は不明であるが、測定値測定値(2.84)の記載があった。なお、両
166 方の値が記載されている ECHA (2015)では、被験物質の純度も併記されていた(測定値 2.44
167 は純度:99%、測定値 2.84 は純度:>98%)。評価Ⅱにおいては、ECHA (2015)において試験
168 物質の純度が 99%における測定値 (2.44) を用いる。

169

170 ⑥ヘンリー係数

171 評価Ⅰで採用した値は、PhysProp に記載されている推計値($2.5 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$) であ
172 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。
173 評価Ⅱにおいては水に対する溶解度が 1 mol/L 未満 ($1.9 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$) のため、技術ガイド
174 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 ($1.8 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$) を用いる。

175

176 ⑦Koc

177 評価Ⅰで採用した値は、KOCWIN (v2.00)により推計された値 (3.17 L/kg) である。U.S.
178 EPA (2010) には、EPA テストガイドライン(OPPTS 835.1230)に準拠した試験方法(バッチ
179 平衡を用いた吸脱着法)による測定値(5,528 L/kg) (塩類土壌)が記されていた。ECHA (2015)
180 には、測定値(780~ $1.1 \times 10^4 \text{ L/kg}$) (中央値 : 5,890 L/kg) と記載されていた。また、Koc の
181 値は pH の影響を受けるとの記載もあり、濃度 1 mg/L、pH 7 での大まかな推計値として、
182 $\log Koc=3.5$ ($Koc=3,162 \text{ L/kg}$)と記されている。さらに、ECHA (2010)には、OECD TG 106
183 に準拠した試験方法(バッチ平衡を用いた吸脱着法)により得られた測定値(276 L/kg 及び
184 3,442 L/kg)が報告されている。上記の測定値を参考にすると、pH7.0 での Koc の値は数千
185 のオーダーと考えられるため、評価Ⅱでは U.S. EPA (2010)で記された測定値(5,528 L/kg)
186 を用いる。

187

188 ⑧BCF

189 評価Ⅰで採用した値は、MITI (1996)に記載されている第 2 濃度区の値 (50 L/kg) であ
190 る。MITI (1996) には、OECD TG 305 による測定値 (第 1 濃度区 : <5 L/kg、第 2 濃度区 :
191 <50 L/kg) が記載されており、ECHA (2015)では、魚類における測定値(7.7 L/kg)及び無脊
192 椎動物における測定値(8.0 L/kg)が報告されている。ECHA (2014c)には試験情報の一部が
193 記載されており、魚類における測定値は GLP 適合施設にて OECD TG 305C に準拠したコ

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

194 イの値であり、無脊椎動物における測定値は GLP 適合施設にて OECD TG 305E に準拠し
195 たカキの値である。MITI (1996) より、BCF が 50 L/kg よりも低い値が示唆されることか
196 ら、評価Ⅱにおいては、ECHA (2015)のヨイにおける測定値(7.7 L/kg)を用いる。

197 METI (2017)において採用された垂鉛ピリチオンの BCF は METI (2003)に記載された
198 OECD TG 305 による定常状態での BCF (第 1 濃度区 : 160 L/kg、第 2 濃度区 : 200 L/kg)
199 の測定値の最大値 (第 1 濃度区(1 µg/L) : 200 L/kg)である。

200 ⑨BMF

201 評価Ⅰで採用した値は、logPow (-0.61) 及び BCF (50 L/kg) から技術ガイダンス に従っ
202 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 logPow
203 (2.44) 及び BCF (7.7 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。

204

205 ⑩解離定数

206 ECHA (2015)では、酸もしくは塩基となる官能基を持たないため、解離性物質でないと示
207 唆されるとの記載があった。これに基づき、解離定数は設定しない。

208

209 1-3 分解性（銅ピリチオン）

210 下表にモデル推計に採用した銅ピリチオンの分解に係るデータを示す。

211

212

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	4.5
		オゾンとの反応	0.1
		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	4.7
		加水分解	淡水域：107 海水域：16
		光分解	淡水域：0.21 海水域：0.018 ～ 0.66
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	0.65
		加水分解	淡水域：107
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	5.6
		加水分解	淡水域：107 海水域：16

213 ※平成 29 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
214 一会議（平成 29 年 9 月 11 日）で了承された値。ただし、光分解の半減期（海水域）は MAMPEC (v3.1.0.3)
215 で推計し直した値。

216 1) EPI Suite (2012)

3) U. S. EPA (2010)

217 2) ECHA (2015)

4) Deltares (2016)

218 NA:情報が得られなかったことを示す

219

220 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
221 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。

222

223 ①大気

224 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
225 ても、硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

226 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

227 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
228 ため、AOPWIN (v1.92) により推計された 3.6×10^{-12} cm³/molecule/s を半減期算出に採用

229 する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5.0×10^5 molecule/cm³ とした場合、半
230 減期は 4.5 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (4.5 日) を用いる。

231 ①-2 オゾンとの反応の半減期

232 大気中におけるオゾン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、
233 AOPWIN (v1.91) により推計された 1.1×10^{-16} cm³/molecule/s を半減期算出に採用する。
234 大気中オゾン濃度を技術ガイダンスの 7×10^{11} molecule/cm³ とした場合、半減期は 0.10 日
235 と算出される。評価Ⅱではこの値 (0.10 日) を用いる。

236

237 ②水中

238 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
239 機序別の半減期に関する情報が得られた。

240 ②-1 生分解の半減期

241 ECHA (2015)において、OECD TG 301B 及び OECD TG 301C の試験結果、易分解では
242 ないとしているが、分解しない理由として、水への溶解度が非常に少ないことが挙げられて
243 いる。より水溶解度が大きいナトリウムピリチオンに関して、OECD TG 301B の試験結果
244 により易分解であることから、ピリチオン部分に関しては易分解と考えられるとの記載が
245 ある。また、海水における半減期として 4.4-4.7 日との記載がある。

246 なお、MITI (1996)において、BOD 分解度が 3%、HPLC 分解度が 4%であることから、
247 難分解と判定している。難分解の判定の理由としては、ECHA (2015)で記載されたとおり、
248 水溶解度が低いこと、亜鉛ピリチオンと同様に銅ピリチオンが持つ毒性のためと考えられ
249 る (HSDB)。評価Ⅱでは生分解による半減期を ECHA (2015) の結果の最大値(4.7 日)を用
250 いる。

251 ②-2 加水分解の半減期

252 U.S. EPA (2010)において、EPA ガイドライン OPPTS 835.2120 に基づき淡水では半減
253 期を 235 日 (pH=5)、107 日 (pH=7)、9.1 日 (pH=9)、人工海水では半減期を 16 日 (pH
254 =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淡水域では pH=7 の値である
255 107 日とし、海水域では人工海水(pH=8.2)の値である 16 日とする。

256 ②-3 光分解の半減期

257 U.S. EPA (2010)において、EPA ガイドライン OPPTS 835.2240 に基づき pH 5.0 の緩衝
258 液中における半減期を 36 分、人工海水中(pH 8.2)における半減期を 31 分と算出している。
259 千田ら (2005)においては、東京都 (8 月、北緯 35 度)における自然太陽光下 (光強度: 880
260 W/m³) を用いた光分解度試験を行っており、超純水に溶解させた銅ピリチオンの半減期を
261 20 分と算出している。Turley et al. (2000) においては、人工海水に 154 W/m² のキセノン
262 ランプを照射した場合での半減期を 29.1 分と算出しており、AIST (2007) にも同じ値が掲
263 載されている。

264 評価Ⅱでは、淡水域においては U.S. EPA (2010)の pH 5.0 の緩衝液中における半減期 36

265 分を採用する。採用した値については、自然水における値に補正するため、千田ら(2005)に
266 記載されている銅ピリチオンの紫外可視吸収スペクトルを用いて Zepp, & Cline (1977) 、
267 Belzile, C et al. (2002)、に基づき、水中での光透過率等を考慮した水深 1 m での値に補正
268 し、淡水域では 0.21 日(309 分) を用いる。海水域では千田ら(2005)に記載されている銅ピ
269 リチオンの紫外可視吸収スペクトルから得られる吸光度と ECHA(2015)に記載された量子
270 収率をもとに MAMPEC (v3.1.0.3)により水深 1~23 m の値を推計¹し、0.018 ~ 0.66 日
271 (26~954 min)を用いる。なお、Grunnet et al. (2005)においては、デンマーク、イスフィヨ
272 ルドの海域で銅ピリチオンの太陽光による光分解度試験が行われており、1 時間の照射で
273 60%の銅ピリチオンが回収された。その結果を基に、水深 0.5 m における銅ピリチオンの
274 光分解速度として、0 次反応に従うと仮定したときの半減期(209 分)及び 1 次反応に従うと
275 仮定したときの半減期(122 分)が算出されている。

276

277 ③土壌

278 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が、生分解の半減期に関する
279 情報が得られた。

280 ③-1 生分解の半減期

281 ECHA (2015)では好気条件、25°C、pH6.6、砂壤土における半減期 13-15.5 時間を利用し
282 て 12°Cに外挿した値(44 時間)が記載されている。評価Ⅱでは、土壌中での生分解半減期は
283 20°Cに近い、25°Cの測定値である 15.5 時間(0.65 日)とする。

284 ③-2 加水分解の半減期

285 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
286 技術ガイダンスに従って、淡水域における水中の加水分解半減期と同じ 107 日とする。

287

288 ④底質

289 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
290 情報が得られた。

291 ④-1 生分解の半減期

292 US EPA (2010) において、EPA ガイドライン OPPTS 835.4400 (OECD TG 308 に準拠)
293 に基づく好気性生分解試験では、底質の半減期を 5 時間(0. 21 日) (淡水) と算出している。
294 また、EPA ガイドライン OPPTS 835.4300(OECD TG 308 に準拠)に基づく嫌気性生分解
295 試験では、底質の半減期を 31 分(海水)と算出している。ECHA (2015)では、好気性条件下
296 における底質の分解半減期として、21 日が設定されており、嫌気性条件下における底質の
297 分解半減期として、0.12-0.41 日が設定されている。

298

¹ 例として METI (2017)の資料 2-2 参考資料 3-2 に掲載の港湾パラメータを推計に利用した。

299 技術ガイダンスに従い、好氣的条件下の半減期 (21 日 (海水)) と嫌氣的条件下での半減
300 期 (0.41 日 (海水)) を利用して底質中での生分解による半減期を 5.6 日と求めた。評価Ⅱ
301 では底質中の生分解半減期を 5.6 日とする。

302 ④-2 加水分解の半減期

303 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
304 技術ガイダンスに従って、淡水域における水中の加水分解半減期と同じ 107 日とし、海水
305 域では人工海水(pH=8.2)の値である 16 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[-]、
 $k_{bio-aer_{sed}}$: 底質での好氣的生分解速度定数[d⁻¹]、 $k_{bio-anaer_{sed}}$: 底質での嫌氣的生分解速度定数[d⁻¹]、
 $k_{abio_{sed}}$: 底質での非生物的な分解速度定数の和[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)

306 1-4 物理化学的性状及び濃縮性 (POSA)

307 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。

308 本採用値は、平成 28 年度第 4 回化審法三省合同審議会 (平成 29 年 3 月 24 日) での亜鉛
309 ピリチオンのリスク評価 (一次) 評価Ⅱに係る審議において用いられた値である。

310

311

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	°C	142 ²⁾	MPBPWIN (v1.43) による推計値	—
沸点	°C	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°C 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°C の推計値	—
有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)	L/kg	0.0285 (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 ³⁾	—
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⁾	—

312 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
313 ビュー会議 (平成 28 年 9 月 13 日) で了承された値

314 2) EPI Suite (2012)

315 3) Franco ら (2008)

316 4) MHLW, METI, MOE (2014)

317 5) ACD/Labs (2015)

318 括弧内の値は参考値であることを示す

319

320

321 1-5 分解性 (POSA)

322 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。

323 本採用値は、平成 28 年度第 4 回化審法三省合同審議会 (平成 29 年 3 月 24 日) での亜鉛ピ

324 リチオンのリスク評価 (一次) 評価Ⅱに係る審議において用いられた値である。

325

326

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
		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
		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
		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
		加水分解	NA

327 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
328 ビュー会議 (平成 28 年 9 月 13 日) で了承された値

329 2) EPI Suite (2012)

330 3) MHLW, METI, MOE (2014)

331 NA: 情報が得られなかったことを示す

332

333 1-6 物理化学的性状及び濃縮性 (PSA)

334 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。
 335 本採用値は、平成 28 年度第 4 回化審法三省合同審議会（平成 29 年 3 月 24 日）での亜鉛ピ
 336 リチオンのリスク評価（一次）評価Ⅱに係る審議において用いられた値である。

337
 338

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 (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) ⁴⁾	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⁾	—

339 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
 340 ビュー会議（平成 28 年 9 月 13 日）で了承された値
 341 2) Aldrich (2015)
 342 3) EPI Suite (2012)
 343 4) Franco ら (2008)
 344 5) MHLW, METI, MOE (2014)
 345 6) ACD/Labs (2014)
 346 括弧内の値は参考値であることを示す
 347
 348

349 1-7 分解性 (PSA)

350 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。

351 本採用値は、平成 28 年度第 4 回化審法三省合同審議会 (平成 29 年 3 月 24 日) での亜鉛
352 ピリチオンのリスク評価 (一次) 評価Ⅱに係る審議において用いられた値である。

353

354

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
		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
		加水分解	NA
		光分解	-
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
		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
		加水分解	NA

355 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
356 ビュー会議 (平成 28 年 9 月 13 日) で了承された値

357 2) EPI Suite (2012)

358 3) MHLW, METI, MOE (2014)

359 4) 千田ら (2005)

360 NA: 情報が得られなかったことを示す

361 -: 定量的な値は得られなかったことを示す

362

363 1-8 出典

- 364 ACD/Labs (2015): Advanced Chemistry Development, Inc. ACD/Percepta 14.0.0.
- 365 AIST (2007): 産業技術総合研究所. 詳細リスク評価書シリーズ 10 銅ピリチオン, 丸善株
366 式会社, 2007.
- 367 Aldrich (2015): 安全データシート, 2-Pyridinesulfonic acid(カタログ番号 661759),
368 <http://www.sigmaaldrich.com/safety-center.html>
- 369 CERI (2002): 化学物質安全性(ハザード)評価シート硫酸銅(II), 一般財団法人化学物質評価
370 研究機構, 平成 14 年 3 月作成
371 http://www.cerij.or.jp/evaluation_document/hazard/F2001_59.pdf
- 372 Deltares (2016): Deltares, MAMPEC (Marine antifoulant model to predict
373 environmental concentrations) Ver. 3.1.0.3, 2016.
- 374 ECHA (2010a): European Chemicals Agency. Competent Authority Report Work
375 Programme for Review of Active Substances in Biocidal Products Pursuant to Council
376 Directive 98/8/EC Copper pyrithione (PT 21) Applicant: TNO Quality of Life
377 DOCUMENT III A1–A3 Applicant, Identity and Physical and Chemical Properties
378 Rapporteur Member State: Sweden Draft December 2010,
379 <http://dissemination.echa.europa.eu/Biocides/factsheet?id=1275-21>
- 380 ECHA (2010b): ECHA. Competent Authority Report COPPER PYRITHIONE (PT21)
381 DOCUMENT IIIA 7.1–7.3 Fate Applicant: API Rapporteur Member State: Sweden
382 Draft December 2010, [http://dissemination.echa.europa.eu/Biocides/factsheet?id=1275-](http://dissemination.echa.europa.eu/Biocides/factsheet?id=1275-21)
383 21
- 384 ECHA (2010c): ECHA. Competent Authority Report COPPER PYRITHIONE (PT21)
385 DOCUMENT IIIA 7.4–7.6 Ecotoxicological studies Applicant: API Rapporteur Member
386 State: Sweden Draft December 2010,
387 <http://dissemination.echa.europa.eu/Biocides/factsheet?id=1275-21>
- 388 ECHA (2014a): ECHA. Competent Authority Report According to Directive 98/8/EC
389 Copper pyrithione CAS 14915-37-8 Active substance in Biocidal Products Product Type
390 21 (Antifouling products) Applicant: Arch Chemicals Inc. DOCUMENT III A Sections
391 1–3: Applicant, Identity and Physical and Chemical Properties Rapporteur Member
392 State: Sweden Final CAR September 2014,
393 <http://dissemination.echa.europa.eu/Biocides/factsheet?id=1275-21>

394 ECHA (2014b): ECHA. Competent Authority Report COPPER PYRITHIONE (PT 21)
395 DOCUMENT IIIA 7.1–7.3 Fate Applicant: Arch Rapporteur Member State: Sweden
396 Final CAR September 2014 Version with reduced amount of format templates,
397 <http://dissemination.echa.europa.eu/Biocides/factsheet?id=1275-21>

398 ECHA (2014c): ECHA. Competent Authority Report COPPER PYRITHIONE (PT 21)
399 Arch Chemicals DOCUMENT IIIA 7.4–7.5 Ecotoxicology Rapporteur Member State:
400 Sweden Final CAR September 2014 Version with reduced amount of format templates,
401 <http://dissemination.echa.europa.eu/Biocides/factsheet?id=1275-21>

402 ECHA (2015): ECHA. Regulation (EU) No 528/2012 concerning the making available
403 on the market and use of biocidal products Evaluation of active substances Assessment
404 Report PUBLIC VERSION Copper pyrithione Product type 21 [Sept 2014, public
405 version May 2015] Rapporteur Member State: Sweden,
406 <http://dissemination.echa.europa.eu/Biocides/factsheet?id=1275-21>

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

408 Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partiton Coefficient
409 Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemistry, Environ. Toxicol. and
410 Chem., 27(10):1995-2004.

411 K. S. GRUNNET and I. DAHLLÖF. (2005): Environmental Fate of the Antifouling
412 Compound Zinc Pyrithione in Seawater, Environmental Toxicology and Chemistry, Vol.
413 24, No. 12, pp. 3001–3006, 2005

414 HSDB: U.S. National Institute of Health. Hazardous Substances Data Bank.
415 <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2017-07-18 閲覧).

416 Lofts et al. (2009): Speciation of pyrithione in freshwaters. NERC/Centre for Ecology
417 and Hydrology, 16pp. (CEH Project Number: C03634)
418 <http://nora.nerc.ac.uk/9924/2/N009924CR.pdf>

419 Maraldo K., Dahllöf I. (2004): Indirect estimation of degradation time for zinc
420 pyrithione and copper pyrithione in seawater. Mar Pollut Bull 48:894–901, 2004

421 METI (2003): METI. ビス (2-メルカプトピリジン=N-オキシド) 亜鉛 (II) [別名:ビス
422 (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度
423 試験. 既存化学物質点検, 2003.

424 METI (2017): METI. 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

425 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 (2 H)
426 -オラト-κ O] 亜鉛 (I I) 優先評価化学物質通し番号 139, 2017,
427 http://www.meti.go.jp/committee/summary/0003776/h28_04_haifu.html

428 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
429 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.

430 MITI (1996): 審査情報ビス (2-スルフィドピリジン-1-オラト) 銅, 1996, [z](#)

431 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-07-18 閲
432 覧).

433 REACH 登録情報 (ECHA): European Chemical Agency. Information on Chemicals -
434 Registered substances. [http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-](http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances)
435 [chemicals/registered-substances](http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances), (2016-07-05 閲覧).

436 Sakkas et al. (2007): Sakkas, V.A., K. Shibata, Y. Yamaguchi, S. Sugasawa, and T.
437 Albanis (2007) Aqueous phototransformation of Zinc Pyrithione: Degradation Kinetics
438 and Byproduct Identification by Liquid Chromatography-Atmospheric Pressure
439 Chemical Ionisation Mass Spectrometry, Journal of Chromatography A, 1144, 175-182.

440 U.S. EPA (2004a): U.S. Environmental Protection Agency. Environmental Fate Science
441 Chapter on Zinc Pyrithione (Zinc Omadine®) For Reregistration Eligibility Document
442 (RED), 2004.
443 [http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-](http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004-0147)
444 [2004-0147](http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004-0147)

445 U.S. EPA (2004b): U.S. Environmental Protection Agency. Zinc Pyrithione Ecological
446 Hazard and Environmental Risk Characterization Chapter for the Reregistration
447 Eligibility Decision (RED) Document (D301371), 2004.
448 [http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-](http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004-0147)
449 [2004-0147](http://www.regulations.gov/#!docketBrowser;rpp=25;po=0;dct=SR;D=EPA-HQ-OPP-2004-0147)

450 U.S. EPA (2008): U.S. Environmental Protection Agency. Copper Pyrithione - Product
451 Chemistry, 2008, [https://www.regulations.gov/document?D=EPA-HQ-OPP-2009-0999-](https://www.regulations.gov/document?D=EPA-HQ-OPP-2009-0999-0013)
452 [0013](https://www.regulations.gov/document?D=EPA-HQ-OPP-2009-0999-0013)

453 U.S. EPA (2010): U.S. EPA. Environmental Fate Science Chapter on Zinc Pyrithione
454 (Zinc Omadine®) and Proposed Bridging to Copper Pyrithione, 2010,
455 <https://www.regulations.gov/document?D=EPA-HQ-OPP-2009-0999-0006>

- 456 U.S. EPA (2012): U.S. EPA. Decision Document for Proposed Registration of Two
457 Products Containing the New Active Ingredient Copper Pyrithione in Antifouling
458 Paints, 2012, <https://www.regulations.gov/document?D=EPA-HQ-OPP-2009-0999-0015>
- 459 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
460 技術安全研), 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
461 動に関する研究, 海上技術安全研究所報告, 第5巻, 第一号, 1-37.
- 462 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
463 研), 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
464 安全研究所研究発表会講演集, Vol.8th, 301-302.

情報源略称	詳細等
ACD Labs	Advanced Chemistry Development, Inc. ACD/Percepta
AIST	産業技術総合研究所(AIST):「詳細リスク評価書」
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
ECHA	European Chemicals Agencyによる情報 (例) ・Information on Chemicals – Registered substances ・BPR Assessment Reported substances
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SPARC	ARChem. SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry
U.S.EPA	U.S. Environmental Protection Agencyによる情報 (例) ・Copper Omadine Powder AF Product Chemistry Review ・Environmental Fate Science Chapter

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-kO)-2(1H)-pyridinethionato-kS2]-
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 EPI Suite	融点	194.43 °C	194.43	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	○	×			
2	融点	197.27 °C	197.27	MPBPWIN				(Q)SAR	Weighted Value	2C	×	×			
3 ECHA	融点	decomposes	換算不可				キースタディ	測定値	>98% Purity	2A	×	○	decomposes upon melting at 273-279°C		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7_60
4 U.S. EPA	融点	total decomposition at 280°C.	換算不可	OPPTS 830.7200 (OECD TG 102)	Yes	A= Acceptable	キースタディ	測定値	using MELTEMP apparatus Triplicate analyses CuPT 98.0%	1A	×	○	Char formation begins at 271°C, collapse of crystal at 278°C, the first appearance of liquid at 279°C, and total decomposition at 280°C		U.S. EPA (2008) Copper Omadine Powder AF Product Chemistry Review p11
5 AIST	融点	204-250 °C (分解)	換算不可					測定値		2A	×	×	(100.42 kPa)	社団法人日本塗料工業会 (2004c) 塗料原料便覧 改訂8版 p.229-236 (株)エービーアイコーポレーション	詳細リスク評価書10 銅ピリチオン p27

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジニ-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-
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	461.1 °C	461.1			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	○	×			
2	467.20 °C	467.2			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	×	×			
3 ECHA	decompos es	換算不可	換算不可					キースタディ	測定値	>98% Purity	2A	×	○	decomposes upon melting at 273-279°C		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60
4 U.S. EPA	powdered solid											×	○	NA= technically not applicable		U.S. EPA (2008) Copper Omadine Powder AF Product Chemistry Review p11

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジノー1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-kO)-2(1H)-pyridinethionato-kS2]-
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°C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 ディー該非 (評価Ⅰ)	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	0.000000575 Pa[2C 以下の値を用いて推定 (4) 1]	5.75E-07	4.08E-07	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		4C	○	×			
3 PhysProp	0.00000134 mmHg	1.79E-04	1.27E-04	25 °C					estimated by calculation		4C	×	×		NEELY,WB & BLAU,GE (1985)	
4 ECHA	< 5.0 x 10 ⁻⁷ Pa	5E-07	3.54E-07					キースタディ	direct measurement		2A	×	○			ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60
5	4.3 x 10 ⁻¹⁷ Pa	4.3E-17	3.05E-17	25 °C	Vapour pressure balance (EC A.4) (OECD TG 104)	Yes		1 キースタディ	extrapolation	extrapolation from measurements in the range 190-210°C (>98%)	1A	×	×		Tremain, 1999a Copper pyrrithione: Determination of hazardous physico-chemical properties Safepharm Laboratories Limited, SPL project number 696/039 GLP, unpublished	ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60 ECHA (2010a) Competent Authority Report n9
6 U.S. EPA	less than 5.0 x 10 ⁻⁷ Pascals	5E-07	3.54E-07	25±1 °C	OPPTS 830.7950 (OECD TG 104)	Yes	A= Acceptable	キースタディ	測定値	The gas saturation method was followed	1A	×	○	Two determinations were made.		U.S. EPA (2008) Copper Omadine Powder AF Product Chemistry Review p12-13
7 AIST	4.3 x 10 ⁻¹⁷ Pa	4.3E-17	3.05E-17	25 °C							2A	×	×		社団法人日本塗料工業会 (2004c) 塗料原料便覧 改訂8版 p.229-236 (株)エービーアイコーボレーション	『詳細リスク評価書シリーズ10』P27

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジニ-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-kO)-2(1H)-pyridinethionato-kS2]-
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°C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	16200 mg/L[2C以 下の値を用 いて推定(4)]	16200	15122.8043	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		4C	○	×			
2 PhysProp	171000 mg/L	171000	159629.601	25 °C						estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,W M ET AL. (1996)	
3 ECHA	49 µg/L	0.049	5.66E-02	10 °C	pH 5.9-7.1				キースタ ディ	measured		2A	×	×	non-buffered distilled water		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60
4 ECHA	60 µg/L	0.06	6.00E-02	20 °C	pH 5.9-7.1				キースタ ディ	measured		2A	×	○	non-buffered distilled water		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60
5	150 µg/L	0.15	1.31E-01	30 °C	pH 5.9-7.1				キースタ ディ	measured		2A	×	×	non-buffered distilled water		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60
6	55 µg/L	0.055	5.66E-02	25 °C	pH 5				キースタ ディ	measured		2A	×	×	buffered solutions The differences in water solubility is not considered significant or to be attributed to any dissociation under the conditions of the test		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60
7	102 µg/L	0.102	9.52E-02	25 °C	pH 7				キースタ ディ	measured		2A	×	×	buffered solutions The differences in water solubility is not considered significant or to be attributed to any dissociation under the conditions of the test		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60
8	109 µg/L	0.109	1.02E-01	25 °C	pH 9				キースタ ディ	measured		2A	×	×	buffered solutions The differences in water solubility is not considered significant or to be attributed to any dissociation under the conditions of the test		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60
9	< 3.9 x 10 ⁻⁵ g/L	0.039	0.039	20±0.5 °C	pH 6.3-6.8	Column elution method (EC A.6)	Yes		1	measured		1A	×	×	Water solubility is not pH dependent due to the properties of the molecule.	Hogg AS 2000. Copper pyrrhione: Determination of general physico- chemical properties Safepharm Laboratories Limited, SPL project number 699/038 GLP, unpublished	ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60 ECHA (2012a) Competent Authority Report p11
10 U.S. EPA	49 µg/L	0.049	5.66E-02	10 °C		OPPTS 830.7840/OPPT S 830.7860	Yes	A= Acceptable	キースタ ディ	measured	Column elution method	1A	×	×	At least four determinations were made per temperature.		U.S. EPA (2008) Copper Omadine Powder AF Product Chemistry Review p12
11 U.S. EPA	60 µg/L	0.06	6.00E-02	20 °C		OPPTS 830.7840/OPPT S 830.7860	Yes	A= Acceptable	キースタ ディ	measured	Column elution method	1A	×	○	At least four determinations were made per temperature.		U.S. EPA (2008) Copper Omadine Powder AF Product Chemistry Review p12
12	150 µg/L	0.15	1.31E-01	30 °C		OPPTS 830.7840/OPPT S 830.7860	Yes	A= Acceptable	キースタ ディ	measured	Column elution method	1A	×	×	At least four determinations were made per temperature.		U.S. EPA (2008) Copper Omadine Powder AF Product Chemistry Review p12

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-kO)-2(1H)-pyridinethionato-kS2]-
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°C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
13 AIIST	0.1 mg/L	0.1										2A	×	×		社団法人日本塗料工業会 (2004c) 塗料原料便覧 改訂8版 p.229-236 Arch Chemical Inc.	『詳細リスク評価書シリーズ10』P27
14	< 3.9 x 10 ⁻⁵ g/L	0.039										2A	×	×		社団法人日本塗料工業会 (2004c) 塗料原料便覧 改訂8版 p.229-236 (株)エービーアイコーポレーション	『詳細リスク評価書シリーズ10』P27

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジニ-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-kO)-2(1H)-pyridinethionato-kS2]-
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	-0.61	-0.61			KOWWIN				(Q)SAR		2C	○	×			
2	-1.4668	-1.4668			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
3 PhysProp	-0.3	-0.3							estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995)	
4 ECHA	2.44	2.44	21 °C	pH 7					キースタディ		2A	×	○	99% purity, non-buffered distilled water		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60
5	2.84	2.84	22.5±0.5 °C	pH 5.8- 6.1	Shake-flask method (EC A.8)	Yes		1	キースタディ	measured	1A	×	×	>98% purity, non-buffered distilled water	Hogg AS 2000, Copper pyrrhione: Determination of general physico- chemical properties Safepharm Laboratories Limited, SPL project number 699/038 GLP, unpublished	ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60 ECHA (2012a) Competent Authority Report n12
6	~2.7	2.7		pH 5					estimated by calculation		4C	×	×	No significant pH dependency expected but given the findings for the water solubility a log Pow of ~2.7 at pH5 is anticipated		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7
7 U.S. EPA	2.44	2.44	21±1 °C		OPPTS 830.7550/OP PTS 830.7560/OP PTS 830.7570 Shake-flask method	Yes	A= Acceptable		キースタディ	measured	1A	×	○			U.S. EPA (2008) Copper Omadine Powder AF Product Chemistry Review p12
8 AIST	2.84	2.84							キースタディ		2A	×	×		社団法人日本塗料工業会 (2004c) 塗料原料便覧 改訂8版 p.229-236 (株)エービーアイコーポレーション	『詳細リスク評価書シリー ズ10』P27, 34
9	1.4	1.4									2A	×	×	環境庁 (2004) 平成11年度 化学物 質分析法開発調査報告書(その1) (株)エービーアイコーポレーション	『詳細リスク評価書シリー ズ10』P27	

基本情報

PACS_F等	84000
PACS_Name等	ビス(2-スルフィドピリジニ-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA_IN	Copper, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-
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	3.166 L/kg[2C 以下の値を用 いて推定 (4)]	3.166				KOCWIN				(Q)SAR		4C	○	×			
2 U.S. EPA	Kd	38.7 mL/g	38.7			塩類	OPPTS 835.1230			キースタディ	測定値		2A	×	×		Ritter, J. (2002) Adsorption/Desorption (Batch Equilibrium) Characteristics of Copper Omadine. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 10 p. (OPPTS 835.1240, 835.1230)	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 10 U.S. EPA (2012) Decision Document, p15
3 U.S. EPA	Koc	5528 mL/g	5528			塩類	OPPTS 835.1230			キースタディ	測定値		2A	×	○		Ritter, J. (2002) Adsorption/Desorption (Batch Equilibrium) Characteristics of Copper Omadine. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 10 p. (OPPTS 835.1240, 835.1230)	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 10 U.S. EPA (2012) Decision Document, p15
4 ECHA	Koc	780 to 11,000 L/Kgoc	5890							キースタディ	測定値		2A	×	×	the adsorption and desorption log KOC varied strongly with soil or sediment pH		ECHA (2015) BPR Assessment Report p43, 70
5	log Koc	3.5	3162.27766		pH 7	soil or sediment					推計値	A rough estimate	4C	×	×			ECHA (2015)BPR Assessment Report p70
6	log Koc	2.5	316.227766		pH 5	soil or sediment					推計値	A rough estimate	4C	×	×			ECHA (2015)BPR Assessment Report p70
7	Koc	276 mL/g	276		pH 8.1-8.8	Sand [%] 95.50 Silt [%] 2.24 Clay [%] 2.26 Organic carbon [%] 0.3	OECD 106	Yes	1		測定値	HPLC	2A	×	×	Two vessels per concentration	DeVette HQM, Van Es C (2002b) A study on the adsorption/desorption of copper pyrrithione to two sediment types using [14C] copper pyrrithione (OECD 106, SETAC-Europe). TNO Chemistry, Report No: V2422/05, September 5, 2002 (unpublished) including Amendment 01 Hamwijk, C. (2006)	ECHA (2012a) Competent Authority Report p87-98
8	Kd	1.7 mL/g	1.7		pH 8.1-8.8	Sand [%] 95.50 Silt [%] 2.24 Clay [%] 2.26 Organic carbon [%] 0.3	OECD 106	Yes	1		測定値	HPLC	2A	×	×	Two vessels per concentration	DeVette HQM, Van Es C (2002b) A study on the adsorption/desorption of copper pyrrithione to two sediment types using [14C] copper pyrrithione (OECD 106, SETAC-Europe). TNO Chemistry, Report No: V2422/05, September 5, 2002 (unpublished) including Amendment 01 Hamwijk, C. (2006)	ECHA (2012a) Competent Authority Report p87-98

基本情報

PACS_F等	84000
PACS_Name等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA_IN	Copper, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-
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
9	Koc	3442 mL/g	3442		pH 8.0-8.5	Sand [%] 85.03 Silt [%] 9.68 Clay [%] 5.29 Organic carbon [%] 0.6	OECD 106	Yes	1		測定値	HPLC	2A	×	×	Two vessels per concentration	DeVette HQM, Van Es C (2002b) A study on the adsorption/desorption of copper pyrrithione to two sediment types using [14C] copper pyrrithione (OECD 106, SETAC-Europe). TNO Chemistry, Report No: V2422/05, September 5, 2002 (unpublished) including Amendment 01 Hamwijk, C. (2006)	ECHA (2012a) Competent Authority Report p87-98
10	Kd	10.3 mL/g	10.3		pH 8.0-8.5	Sand [%] 85.03 Silt [%] 9.68 Clay [%] 5.29 Organic carbon [%] 0.6	OECD 106	Yes	1		測定値	HPLC	2A	×	×	Two vessels per concentration	DeVette HQM, Van Es C (2002b) A study on the adsorption/desorption of copper pyrrithione to two sediment types using [14C] copper pyrrithione (OECD 106, SETAC-Europe). TNO Chemistry, Report No: V2422/05, September 5, 2002 (unpublished) including Amendment 01 Hamwijk, C. (2006)	ECHA (2012a) Competent Authority Report p87-98
11	AIST	Log Koc	2.63	426.5795188						キースタディ	推計値		4C	×	×	Kow(2.84)からの推計値	Karickhoff (1981) Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments and soils	『詳細リスク評価書シリーズ 10』 P49

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-
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	[Incomplete]	算出不可					(Q)SAR		3	×	×			
2 PhysProp	0.0000000246 atm· m ³ /mol	0.002492595					estimated by calculation		4C	○	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1991)	
3 ECHA	3.48 x 10 ⁻¹³ Pa· m ³ /mol		25 °C			1 キースタディ	estimated by calculation	Calculated using extrapolated vapour pressure and a water solubility of 39 µg/L	2C	×	×	calculation based on study results, not vety relevant due to vety low vapour pressure		ECHA (2015) BPR Assessment Report p7, 60 ECHA (2012a) Competent Authority Report p9
4 Henry計算式	0.001842575						推計値	H=VP/(WS/MW)	2C	×	○	VP(3.5 x 10 ⁻⁷), WS(0.06)、 MW(315.87)を用いて計算		MHLW, METI, MOE (2014) I-39

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper_bis[1-(hydroxy-kO)-2(1H)-pyridinethionato-kS2]-
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 ディー該非 (評価Ⅰ)	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		1			BCF		3.162 L/kg (we)(2C以 下の値を用 いて推定 (4))	3.162	BCFBAFWIN				(Q)SAR		4C	×	×				
2 新規審査	低蓄積	1					<5	5					測定値		1A	×	×				
3	低蓄積	2					<50	50					測定値		1A	○	×				
4 ECHA	低蓄積				BCF		7.7 L/kg	7.7	OECD 305C	Yes		キースタディ	測定値	fish Carp, Cyprinus carpio	2A	×	○		Bioconcentration study of CuOM with Caip, MitsubishiKasei Institute of Toxicology and Environmental Sciences, Kokohama, Japan, Repo1t No. 4BI51(2)G (m1published)	ECHA (2015) BPR Assessment Report p45,73 ECHA (2014c) Competent Authority Report p344-354	
5	低蓄積				BCF		8.0 L/kg	8	OECD 305E	Yes		キースタディ	測定値	Invertebrates Oyster, Crassostrea virginica	2A	×	×		(2001) Bioconcentration test with and the oyster, Crassostrea virginica, T.R Wilbury Laboratories, Inc., Marblehead, MA USA, Repo1t No. 1680-0L (1mpublished)	ECHA (2015) ECHA BPR Assessment Report p45,73 ECHA (2014c) Competent Authority Report p335-371	
6		1	0.3 µg/L	60 days	BCF		3551 L/kg		OECD 305.	Yes	1		測定値		3	×	×		A very high BCF value which was observed in one of the API studies may be due to sorption of pyrithione (and/or bound residues or even inadvertently formed pyrithione disulfide) to fish food which according to BCF guidelines shall be removed within 30 minutes (which it probably was not)	A bio-concentration test with copper pyrithione and the fish species Brachydanio rerio following OECD Guideline 305. 1NO Nutrition and Food Research, Report No: V2422/08, December 2003 (unpublished)	ECHA (2015) BPR Assessment Report p45 ECHA (2012c) Competent Authority Report p112-115
7		2	1.0 µg/L	60 days	BCF		4451 L/kg		OECD 305.	Yes	1		測定値		3	×	×		A very high BCF value which was observed in one of the API studies may be due to sorption of pyrithione (and/or bound residues or even inadvertently formed pyrithione disulfide) to fish food which according to BCF guidelines shall be removed within 30 minutes (which it probably was not)	A bio-concentration test with copper pyrithione and the fish species Brachydanio rerio following OECD Guideline 305. 1NO Nutrition and Food Research, Report No: V2422/08, December 2003 (unpublished)	ECHA (2015) BPR Assessment Report p45 ECHA (2012c) Competent Authority Report p112-115

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-
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
ECHA		換算不可						1				○	Copper pyrrithione does not have acid or base properties. pKa can not be detennined (considering stmctural formula it is not expected that the molecule can be ionized).	MAK WA 2003 Statement on the explosive properties, oxidising properties, and water solubility of Cu pyrrithione TNO PML, statement 014.15033/01.47 No GLP, unpublished	ECHA (2015) BPR Assessment Report p60

基本情報

PACS F等	84000
PACS Name等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-kO)-2(1H)-pyridinethionato-kS2]-
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	値の詳細	キースタディ該非(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		362.5314E-12 cm ³ /molec ule/sec				4.43E-02	25 °C		AOPWIN					(Q)SAR		○			
2 EPI Suite	大気	オゾンとの反応		10.530000E-17 cm ³ /molec ule/sec				317.447642	25 °C		AOPWIN					(Q)SAR		○			
3	水域	生分解									BIOWIN	Weeks-Months				(Q)SAR	Biowin3 Ultimate Biodegradation	x			
4 PhysProp	大気	OHラジカルとの反応		0.00000000151 cm ³ /molec ule/sec				0.10625877	25 °C							estimated by calculation		x		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1993)	
AIST	水域(水(非生物))	光分解	2.3 x 10 ⁻²			0.5 min				7	OECD Proposal for new guideline				キースタディ	measured	(光条件:キセノンランプ)	x		(株)エービーアイコーポレーション 出展:(社)日本塗料工業会(2004c)	『詳細リスク評価書 シリーズ10』P32
	水域(人工海水(非生物))	光分解	4.0 x 10 ⁻⁴			29.1 min				8.2	EPAガイドライン(FIFRA)の試験方法による(30日間の実験から推定)				キースタディ	measured	(光条件:キセノンランプ(154 watts/m2))	x		Turley et al. (2000)	『詳細リスク評価書 シリーズ10』P32
	水域(水(非生物))	加水分解	1.9 x 10 ⁻⁶			約100 h			60 °C	5	OECD テストガイドライン 111				キースタディ	measured		x		(株)エービーアイコーポレーション 出展:(社)日本塗料工業会(2004c)	『詳細リスク評価書 シリーズ10』P33
	水域(水(非生物))	加水分解	1.9 x 10 ⁻⁶			約101 h			60 °C	7	OECD テストガイドライン 111				キースタディ	measured		x		(株)エービーアイコーポレーション 出展:(社)日本塗料工業会(2004c)	『詳細リスク評価書 シリーズ10』P33
	水域(水(非生物))	加水分解	3.4 x 10 ⁻⁶			26.3 h			60 °C	9	OECD テストガイドライン 111				キースタディ	measured		x		(株)エービーアイコーポレーション 出展:(社)日本塗料工業会(2004c)	『詳細リスク評価書 シリーズ10』P33
	水域(人工海水(無菌))	加水分解	6.4 x 10 ⁻⁷			11.9 day			25 °C	9	EPAガイドライン(FIFRA)の試験方法による(19日間の実験から推定)				キースタディ	measured		x		Byrnes(2001)	『詳細リスク評価書 シリーズ10』P33
	水域(人工海水(非生物))	加水分解	6.2 x 10 ⁻⁷			12.9 day			22-25 °C	8.2	EPAガイドライン(FIFRA)の試験方法による(30日間の実験から推定)				キースタディ	measured		x		Turley et al. (2000)	『詳細リスク評価書 シリーズ10』P33
U.S. EPA	水域	加水分解				235 days				pH 5	OPPTS 835.2120				キースタディ	測定値		x		Fenn, R. (1999) Hydrolysis of (Pyridine-2,6-Carbon 14) Copper Omdine: Final Report: Lab Project Number: 40-96B10CUOM. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 106 p. (OPPTS 835.2120)	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 9, 11 U.S. EPA (2012) Decision Document n14

基本情報

PACS F等	84000
PACS Name等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA-IN	Copper, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-
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-該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
U.S. EPA	水域	加水分解				107 days				pH 7	OPPTS 835.2120				キースタディ	測定値		○		Fenn, R. (1999) Hydrolysis of (Pyridine-2,6-Carbon 14) Copper Omadine: Final Report: Lab Project Number: 40-96B10CUOM. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 106 p. (OPPTS 835.2120)	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 9, 11 U.S. EPA (2012) Decision Document p14
	水域	加水分解				9 days				pH 9	OPPTS 835.2120				キースタディ	測定値		×		Fenn, R. (1999) Hydrolysis of (Pyridine-2,6-Carbon 14) Copper Omadine: Final Report: Lab Project Number: 40-96B10CUOM. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 106 p. (OPPTS 835.2120)	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 9, 11 U.S. EPA (2012) Decision Document p14
U.S. EPA	水域(海水)	加水分解				16 days				pH 8.2	OPPTS 835.2120				キースタディ	測定値		○		Fenn, R. (1999) Hydrolysis of (Pyridine-2,6-Carbon 14) Copper Omadine: Final Report: Lab Project Number: 40-96B10CUOM. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 106 p. (OPPTS 835.2120)	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 9, 11 U.S. EPA (2012) Decision Document p14
U.S. EPA	水域	光分解				36 min				pH 5	OPPTS 835.2240				キースタディ	測定値		×		Fenn, R. (2000) Photolysis of (Pyridine-2,6-Carbon 14) Copper Omadine: Final Report: Lab Project Number: 56-98B10CUPT. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 185 p. (OPPTS 835.2240)	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 9, 11 U.S. EPA (2012) Decision Document p14
U.S. EPA	水域(海水)	光分解				31 min				pH 8.2	OPPTS 835.2240				キースタディ	測定値		×		Fenn, R. (2000) Photolysis of (Pyridine-2,6-Carbon 14) Copper Omadine: Final Report: Lab Project Number: 56-98B10CUPT. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 185 p. (OPPTS 835.2240)	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 9, 11 U.S. EPA (2012) Decision Document p14
ECHA	水域	加水分解				63 day			20-25 °C	pH 3					キースタディ	測定値		×	n=2		ECHA (2015) BPR Assessment Report p43, 68
	水域	加水分解				8-230 day			20-25 °C	pH 5					キースタディ	測定値		×	n=4		ECHA (2015) BPR Assessment Report p43, 68
	水域	加水分解				108 day			20-25 °C	pH 7					キースタディ	測定値		×	n=5		ECHA (2015) BPR Assessment Report p43, 68
	水域(海水)	加水分解				12.9-96 day			20-25 °C	pH 8.2	FIFRA 161-1 (similar to OECD111)		Yes		キースタディ	測定値		×	n=3		ECHA (2015) BPR Assessment Report p43, 68 ECHA (2014b) Competent Authority Report p2-12
	水域	加水分解				7.4-123 day			20-25 °C	pH 9	FIFRA 161-1 (similar to OECD111)		Yes		キースタディ	測定値		×	n=3		ECHA (2015) BPR Assessment Report p43, 68 ECHA (2014b) Competent Authority Report p2-12
	水域	加水分解				41 day			20-25 °C	pH 11					キースタディ	測定値		×	n=2		ECHA (2015) BPR Assessment Report p43, 68
	大気	OHラジカルとの反応			1.5 × 10 ⁶ (radicals)/m ^l	26-160 hr										推計値	AOPWIN	×			ECHA (2015) BPR Assessment Report p43, 70

基本情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-κO)-2(1H)-pyridinethionato-κS2]-
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-該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
Grunnet et al. (2005)	水域(海水)	光分解				209 ± 76 min	60%	0.14513889								estimated	zero-order reaction	x	The bottles in Isefjorden were placed at 0.5 m below the surface. May 30, 2004 between 1:16 and 2:18 PM. The weather was fine.		Grunnet et al. (2005) p2 and 5
	水域(海水)	光分解				122 ± 25 min	60%	0.14513889								estimated	first-order degradation reaction	x	The bottles in Isefjorden were placed at 0.5 m below the surface. May 30, 2004 between 1:16 and 2:18 PM. The weather was fine.		Grunnet et al. (2005) p2 and 5

参考情報

PACS F 等	84000
PACS Name 等	ビス(2-スルフィドピリジン-1-オラト)銅
CASRN	14915-37-8
CA IN	Copper, bis[1-(hydroxy-KO)-2(1H)-pyridinethionato-KS2]-
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誌非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
AIIST		6%分解(28日後)			OECD TG 301B				experimental result		(株)エービーアイコーポレーション 出展(社)日本塗料工業会(2004c)	『詳細リスク評価書シリーズ10』P33	
新規審査	難分解	3%	BOD					キースタディ	測定値				
	難分解	4%	HPLC					キースタディ	測定値				
U.S. EPA		半減期34 min		2-mercaptopyridine Max of 78 % by 7days, 2.3 % by 182 days (end of study)	OPPTS 835.4300			キースタディ	測定値		Anaerobic Aquatic Metabolism Saltwater system	Ritter, J. (1999) Anaerobic Aquatic Metabolism of (pyridine-2,6-(carbon-14)) Copper Omadine in Marine Water and Sediment: Lab Project Number: 50-97B10CUOM. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 201 p.	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 9, 11 U.S. EPA (2012) Decision Document, p15
		半減期4.7 hr		Omadine sulfonic acid: Max of 42 % by 7 days, 1.7 % by 84 days (end of study) Omadine sulfonic acid: Max of 29-35 % by 21-84 days Omadine thiosulfonic acid: Max of 41 % by 1 day, 4.4 % by 84 days Pyridine sulfonic acid (M-7): Max of 25 % by 84 days	OPPTS 835.4400			キースタディ	測定値		Aerobic Aquatic Metabolism Freshwater system	Ritter, J. (1999) Aerobic Aquatic Metabolism of (pyridine-2,6-(carbon-14)) Copper Omadine in Marine Water and Sediment: Lab Project Number: 42-96B10CUOM. Unpublished study prepared by Arch Chemicals, Inc. 168 p.	U.S. EPA (2010) Environmental Fate Science Chapter, p2, 9, 11 U.S. EPA (2012) Decision Document, p15
ECHA		分解速度 0.21-0.23 d ⁻¹		PSA		No		キースタディ			Biodegradation in seawater	sea water dieaway: comparative study, Arch Chemicals, Inc., Cheshire, CT, USA, (unpublished)	ECHA BPR Assessment Report p68 ECHA (2014b) Competent Authority Report p89-103
ECHA		sfoDT50 of 4.4-4.7 days		PSA		No		キースタディ			Biodegradation in seawater	sea water dieaway: comparative study, Arch Chemicals, Inc., Cheshire, CT, USA, (unpublished)	ECHA BPR Assessment Report p68 ECHA (2014b) Competent Authority Report p89-103
	Not readily biodegradable			PSA	OECD TG 301B, 301C	Yes		キースタディ				Ready biodegradability test of - . Mitsubishi Kasei Institute of Toxicological and Environmental Sciences, Yokohama, Japan, Repo1t No. 4B150G (unpublished) Assessment of Ready Biodegradability: C02 Evolution Test. SafePharm Laboratories, Derbyshire, UK, SPL Project Number 1597/012 (unpublished) Assessment of Ready Biodegradability: C02 Evolution Test. SafePharm Laboratories, Derbyshire, UK, SPL Project Number 1597/009 (unpublished)	ECHA BPR Assessment Report p42, 68 ECHA (2014b) Competent Authority Report p63-88
ECHA		44 hours				No		キースタディ	推計値	extrapolated to 12°C	DT50 was 13 h and 15.5 h at 25°C, pH 6.6 sandy loam		ECHA BPR Assessment Report p69
ECHA		DT50 of 21 d (at 25°C)		PSA	U.S. EPA Pesticide Assessment Guidelines, Subdivision N, § 162-4, Chemistry: Environmental Fate	Yes		キースタディ			aerobic water-sediment whole system degradation DT50 of 21 d (at 25°C)	Supplemental aerobic aquatic metabolism of ... in marine water and sediment; Arch Chemicals, Inc., Cheshire, CT, USA, Repo1t No. 45-97B10ZnOM (unpublished) Aerobic aquatic metabolism of **** in marine water and sediment; Arch Chemicals, Inc., Cheshire, CT, USA, Repo1t No. 42-96B IOCuOM (unpublished)	ECHA BPR Assessment Report p42, 68-69 ECHA (2014b) Competent Authority Report p125-158
ECHA		DT50 of 0.12-0.41 d		PSA	U.S. EPA Pesticide Assessment Guidelines, Subdivision N, § 162-3, Chemistry: Environmental Fate	Yes		キースタディ			anaerobic water-sediment whole system degradation DT50 of 0.12-0.41 d	Supplemental anaerobic aquatic metabolism of in marine water and sediment; Arch Chemicals, Inc., Cheshire, CT, USA, Repo1t No. 49-97B10ZPT (unpublished) Anaerobic aquatic metabolism of **** in marine water and sediment; Arch Chemicals, Inc., Cheshire, CT, USA, Repo1t No. 50-97B10CuOM (unpublished)	ECHA BPR Assessment Report p42, 68-69 ECHA (2014b) Competent Authority Report p159-188

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

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IIにおけ るキースタ ディ	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-スルホピリジン=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II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°C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 ケーススタディの 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 るケーススタ 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°C	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-スルホピリジン=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°C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°C		WSKOWWIN				(Q)SAR			○			
2 EPI Suite	1E+06	1E+06	1E+06	25°C		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 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	-4.49	-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-スルホピリジン=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	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ら (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 Partiton 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-スルホピリジン=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	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	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		x			

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	139007
物質名称	2-スルホポリジン=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		1			BCF		3.16L/kg	3.16	BCFBAFWIN				(Q)SAR			x			
2 NITEカテゴリー アプローチ							1.3 L/kg	1.3					詳細 II でカテ グリーアプローチ			○	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	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°C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 ケーススタディの 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 るケーススタ 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°C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 ディ	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	1E+06	1E+06	1E+06	25°C		WSKOWWIN				(Q)SAR			○			
2 EPI Suite	1E+06	1E+06	1E+06	25°C		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	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ら (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 Partiton 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	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	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 ディ	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		3.16L/kg	3.16	BCFBAFWIN				(Q)SAR			x			
2 NITEカテゴリー アプローチ							1.3 L/kg	1.3					詳細 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 /molec ule/sec				25 °C		AOPWIN					(Q)SAR				
2 EPI Suite	水域	生分解								BIOWIN	Weeks				(Q)SAR	Biowin3 Ultimate Biodegradation			