

陳 述 書

財団法人 化学品検査協会
化学品安全センター久留米研究所

試験委託者 通商産業省

試験の表題 アセチレン（被験物質番号 K-1077）の1-オクタノールと水との間の分配係数試験

試験番号 81077K

上記試験は、「新規化学物質に係る試験及び指定化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める命令第4条に規定する試験施設について」（環保業第39号、薬発第229号、59基局第85号、昭和59年3月31日、昭和63年11月18日改正）に定める「新規化学物質に係る試験及び指定化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める命令第4条に規定する試験施設に関する基準」及び「OECD Principles of Good Laboratory Practice」(May 12, 1981)に従って実施したものです。

平成 9 年 6 月 13 日

運営管理者



信 頼 性 保 証 書

財団法人 化学品検査協会
化学品安全センター久留米研究所

試験委託者 通商産業省

試験の表題 アセチレン（被験物質番号 K-1077）の1-オクタノールと水との間の
分配係数試験

試験番号 81077K

上記試験は財団法人化学品検査協会化学品安全センター久留米研究所の信頼性保証部門が監査及び
査察を実施しており、監査又は査察を行った内容、日付並びに運営管理者及び試験責任者に報告を
行った日付は以下の通りです。

監査又は査察内容	監査又は査察日	報告日（運営管理者）	報告日（試験責任者）
試験計画書	平成 9年 4月16日	平成 9年 4月16日	平成 9年 4月16日
試験実施状況	平成 9年 4月30日	平成 9年 5月 6日	平成 9年 5月 6日
	平成 9年 5月 1日	平成 9年 5月 6日	平成 9年 5月 6日
生データ及び最終報告書	平成 9年 6月13日	平成 9年 6月13日	平成 9年 6月13日

本最終報告書は、試験の方法が正確に記載されており、内容が試験計画及び標準操作手順に従い、
かつ、生データを正確に反映していることを保証します。

平成 9年 6月13日

信頼性保証部門責任者 XXXXXXXXXX

目 次

	頁
要 約	1
1. 表 題	2
2. 試験委託者	2
3. 試験施設	2
4. 試験目的	2
5. 試験方法	2
6. 適用する優良試験所基準	2
7. 試験期間	3
8. 試験関係者	3
9. 最終報告書作成日	3
10. 最終報告書の承認	3
11. 被験物質	4
12. 分配係数試験の実施	6
13. 試験結果	1 2
14. 試験成績の信頼性に影響を及ぼしたと思われる環境要因	1 3
15. 試資料の保管	1 3
16. 備 考	1 3
17. 表及び図の内容	1 4

付表及び付図

最終報告書

試験番号 81077K

1. 表 題 アセチレン（被験物質番号 K-1077）の1-オクタノールと水との間の分配係数試験
2. 試験委託者 名 称 通商産業省
住 所 (〒100) 東京都千代田区霞が関一丁目3番1号
3. 試験施設 名 称 財団法人 化学品検査協会
化学品安全センター久留米研究所
住 所 (〒830) 福岡県久留米市中央町19-14
TEL (0942) 34-1500
運営管理者 [REDACTED]
4. 試験目的 K-1077の1-オクタノールと水との間の分配係数について知見を得る。
5. 試験方法 「化学物質の審査及び製造等の規則に関する法律の運用について」(昭和62年 3月24日、薬発第291号・62基局第171号)において規定されている「化学物質の分配係数(1-オクタノール/水)測定方法の解説」及び「OECD Guidelines for Testing of Chemicals」に定める"Partition Coefficient (n-octanol/water) : 107. (Shake Flask Method)" (May 12, 1981)に準拠した。
6. 適用する優良試験所基準 「新規化学物質に係る試験及び指定化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める命令第4条に規定する試験施設について」(環保業第39号、薬発第229号、59基局第85号、昭和59年3月31日、昭和63年11月18日改正)に定める「新規化学物質に係る試験及び指定化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める命令第4条に規定する試験施設に関する基準」(以下「GLP基準」という。)及び「OECD Principles of Good Laboratory Practice」(May 12, 1981)に適合して行った。

7. 試験期間

(1) 試験開始日 平成 9年 4月16日

(2) 試験終了日 平成 9年 5月21日

8. 試験関係者

試験責任者

試験担当者

試験資料管理部門責任者

9. 最終報告書作成日

平成 9年 5月21日

作成者

10. 最終報告書の承認

試験責任者

平成 9年 5月21日

氏名

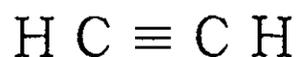
11. 被験物質

本報告書においてK-1077は、次の名称及び構造式等を有するものとする。

11.1 名 称 アセチレン

11.2 構造式等

構造式



分子式 C_2H_2

分子量 26.04

11.3 純 度^{*1}

- (1) 被験物質 98%以上
- (2) 不純物 窒素、アセトン等

被験物質は試薬としての入手が困難であったため、原子吸光分光光度計用のアセチレンを522機器室のバルブから分取して使用した。

11.4 入手先、商品名及びロット番号^{*1}

- (1) 入手先 XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
- (2) 商品名 XXXXXXXXXXXX
- (3) ロット番号 9. 2. 14

*1 入手先添付資料による。

11.5 被験物質の確認

赤外吸収スペクトル (Fig. 7 参照) により構造を確認した。

11.6 溶媒への溶解性

対水 1.6g/L (20±1℃)

対1-オクタノール 2.4g/L (25±1℃)

11.7 保管条件及び保管条件下での安定性

(1) 保管条件 被験物質は試薬としての入手が困難であったため、原子吸光分光光度計用のアセチレンを522機器室のバルブから分取して使用した。よって、試験中の被験物質は高圧ガス設置施設に静置して保存した。

(2) 安定性確認 試験開始前及び測定終了後に被験物質の赤外吸収スペクトルを測定した結果、両スペクトルは一致し、保管条件下で安定であることを確認した (Fig. 7 参照)。

12. 分配係数試験の実施

12.1 試験装置、溶媒及び環境条件

(1) 試験装置

回転振とう機	池本理化工業製 型LA-100
回転数及び時間	回転数 20回/分, 時間 5分間
平衡容器	全容量 100mLガラス製両口バイアル瓶

(2) 溶媒

1-オクタノール	ナカライテスク製 化学物質の分配係数測定用 (通商産業大臣認証試薬)
精製水	高杉製薬製 日本薬局方 (蒸留後、イオン交換樹脂を通して精製処理したもの) ロット番号 A044

(3) 環境条件

実施場所	441恒温室
試験温度	25±1℃

12.2 溶媒の調製

1-オクタノールと精製水とをガラス製容器で24時間以上振とうした後、分離し、それぞれの飽和溶媒として使用した。なお、水飽和1-オクタノール中の水分濃度をカールフィッシャー水分計を用いて測定し、1-オクタノール飽和水中の1-オクタノール濃度をガスクロマトグラフを用いて測定し、各濃度が基準値を満足することを確認した。

12.3 被験物質溶液の調製

内容積100 mLの真空捕集びんに水飽和1-オクタノール約30 mLを入れ、下方のシリコンセプタムを介して、気体状態の被験物質を十分に飽和に達するまで導入した。その後真空捕集びんの上方コックを閉じ、これを被験物質溶液として濃度を測定した。被験物質の測定濃度は2420 mg/L (93.0 mmol/L)であった。

12.4 試験溶液の調製及び被験物質の添加

下表に従って測定条件ごとに、12.2で調製した水飽和1-オクタノール及び1-オクタノール飽和水と12.3で調製した被験物質溶液1 mL (被験物質添加量2.42 mg)を添加した。なお、水飽和1-オクタノール層の数値は、被験物質溶液の添加量を含んだものとした。測定は2連で実施した。

(単位 mL)

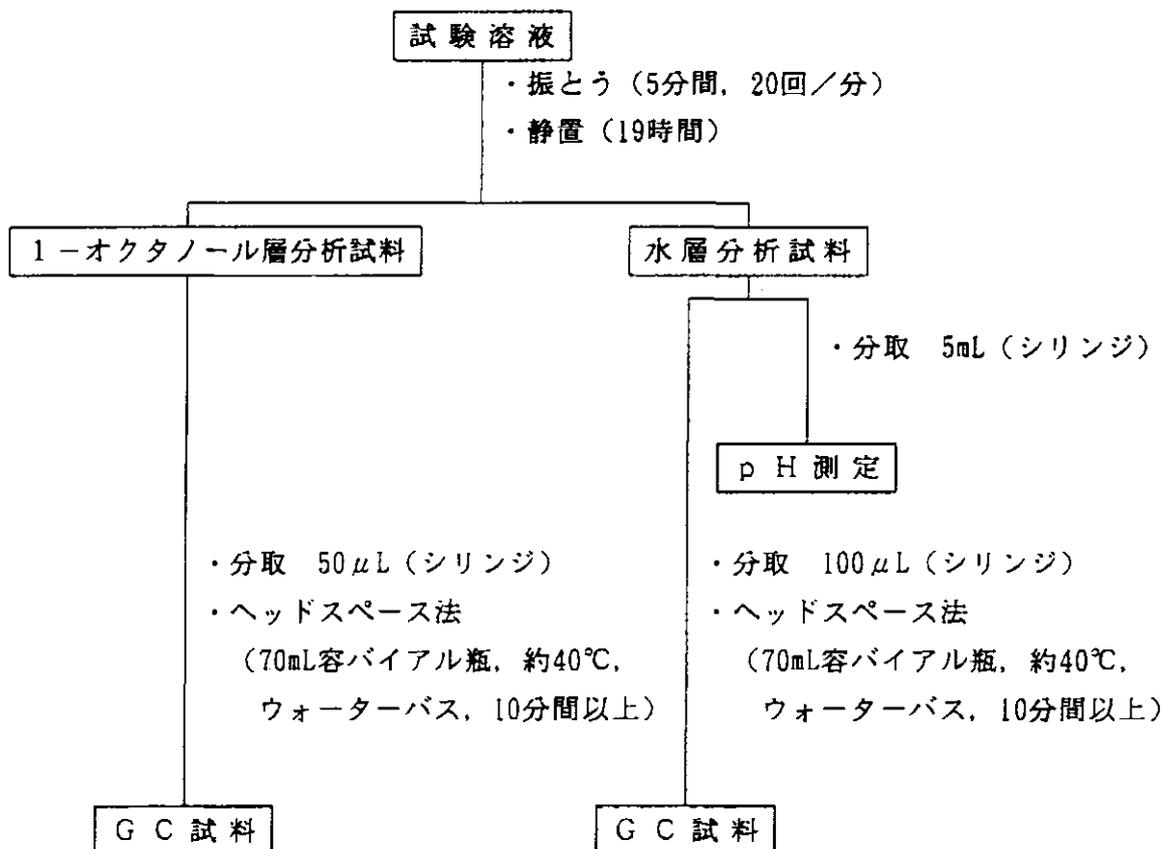
	測定条件-1	測定条件-2	測定条件-3
水飽和1-オクタノール層	5	10	20
1-オクタノール飽和水層	95	90	80

12.5 試験操作

- (1) 平衡容器に1-オクタノール飽和水を満し、気泡が容器に入らないように注意して、セプタムで密栓した。
- (2) 測定条件ごとに12.4で設定した量の水飽和1-オクタノールをシリンジで上方セプタムから注入すると同時に、下方セプタムから1-オクタノール飽和水をシリンジで同量抜き取った。
- (3) 12.4で設定した量の被験物質溶液を12.5(2)と同様の操作で添加した。

このようにして調製した試験溶液を下記のフロースキームに従って分配し、1-オクタノール層分析試料と水層分析試料に分離し、それぞれ前処理を行い、ガスクロマトグラフィー（GC）試料とした。また、試験時の温度及び水層のpHを測定した。

フロースキーム



12.6 被験物質の定量分析

前処理を行って得られたGC試料について、下記の定量条件に基づき被験物質を分析した。GC試料中の被験物質濃度はクロマトグラム上で得られた標準ガスのピーク面積とGC試料のピーク面積とを比較し、比例計算して求めた (Table-1, 2、Fig. 3, 6 参照)。

ピーク面積の定量下限はノイズレベルを考慮して、1-オクタノール層及び水層分析においてそれぞれ1200 $\mu\text{V}\cdot\text{sec}$ (被験物質濃度2.0 $\mu\text{g}/\text{L}$ 、水層分析測定条件-3のみ1.9 $\mu\text{g}/\text{L}$) とした (Fig. 3, 6 参照)。

(1) 定量条件

機	器	ガスクロマトグラフ
		島津製作所製 GC-9A
検	出	器
カ	ラ	ム
		40m \times 1.2mm ϕ ガラス製
	液	相
		G-950 膜厚 25 μm
カ	ラ	ム
		温度
		50 $^{\circ}\text{C}$
試	料	導
		入
		部
		温度
		100 $^{\circ}\text{C}$
キ	ャ	リ
		ヤ
		ー
		ガ
		ス
		20 mL/min
水		
	素	0.5 kg/cm ²
空		
	気	0.7 kg/cm ²
注	入	
		量
		1 mL
感		
		度
	検	出
		器
		レンジ
		10 ¹
	記	録
		計
		レンジ
		8 mV

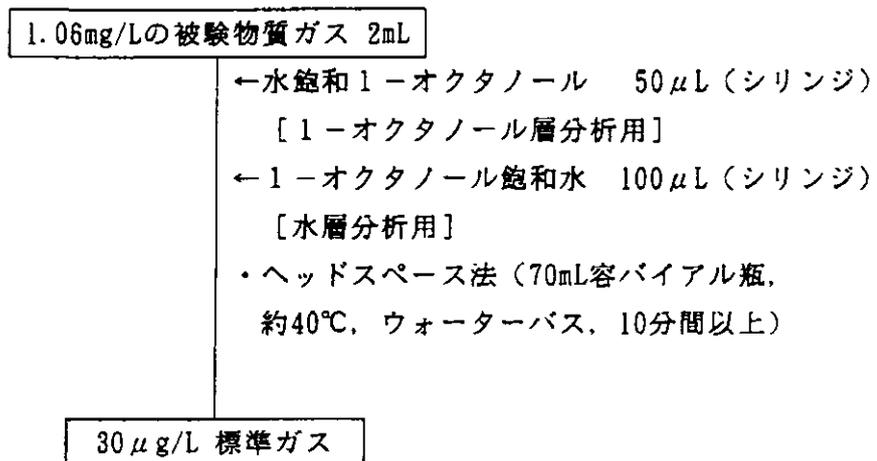
(2) 標準ガスの調製

分析試料中の被験物質濃度を求めるための標準ガスの調製は次のように行った。

- ① 522 機器室のアセチレンのバルブとテドラーバックをゴム管で接続し、気体状態の被験物質が一定流量で流れるようにした。
- ② 接続したゴム管より、ガスタイトシリンジで気体状態の被験物質 1 mL [1.06mg=1mL \times 1.064mg/L (ガス密度, 25 $^{\circ}\text{C}$)] をゆっくり抜き取り、これを減圧にした内容積 1004 mL の真空捕集びんに注入し、大気圧にもどすことにより、1.06 mg/L の被験物質ガスを調製した。

- ③ 1-オクタノール層分析用及び水層分析用として、あらかじめガスタイトシリンジで2 mLの空気を抜いた70 mL容バイアル瓶に、被験物質ガスを2 mL注入し、これを以下のフロースキームに従って前処理を行い、それぞれ30 $\mu\text{g/L}$ の標準ガスを調製した。

フロースキーム



(3) 検量線の作成

1-オクタノール層分析用及び水層分析用として、あらかじめガスタイトシリンジで1、2及び4 mLの空気を抜いた70 mL容バイアル瓶に被験物質ガスを1、2及び4 mLずつ注入して(2)のフロースキームに従って前処理を行い、それぞれ15、30及び61 $\mu\text{g/L}$ の標準ガスを調製した。これらを(1)の定量条件に従って分析し、得られたそれぞれのクロマトグラム上のピーク面積と濃度により検量線を作成した (Fig. 1, 4 参照)。

12.7 ブランク試験

12.5の前処理及び12.6に従って各飽和溶媒に被験物質を加えないブランク試験を測定条件-3で行った。この結果、ブランク試験においてクロマトグラム上、被験物質ピーク位置にはピークは認められなかった (Fig. 2, 5 参照)。

12.8 分配係数の算出

水層中の被験物質濃度及び1-オクタノール層中の被験物質濃度より、以下の式に従って被験物質の分配係数を算出した。

$$P = \log P_{ow}$$

$$P_{ow} = \frac{C_o}{C_w}$$

C_o : 1-オクタノール層中の被験物質濃度 (mg/L)

C_w : 水層中の被験物質濃度 (mg/L)

計算結果は小数点以下2ケタに丸めて表示した。

12.9 数値の取扱い

数値の丸め方は、JIS Z 8202-1985 参考3規則Bの方法に従った。

13. 試験結果

分配係数及び水層のpHは次のとおりであった。

13.1 分配係数測定結果

(Table-4 参照)

		$Pow = \frac{Co}{Cw}$	$P = \log Pow$		
			測定値	平均値	全平均
測定条件-1	a	2.21	0.34	0.34	0.34 標準偏差 = 0.01 最大差 = 0.03
	b	2.18	0.34		
測定条件-2	a	2.23	0.35	0.34	
	b	2.11	0.32		
測定条件-3	a	2.14	0.33	0.33	
	b	2.18	0.34		

13.2 水層のpH測定結果

	測定値	
	試料 a	試料 b
測定条件-1	6.1	6.2
測定条件-2	6.2	6.3
測定条件-3	6.2	6.3

14. 試験成績の信頼性に影響を及ぼしたと思われる環境要因

当該要因はなかった。

15. 試資料の保管

15.1 被験物質

被験物質は通常気体状態にあるため保存が困難である。よって被験物質は保管しない。

15.2 生データ、資料等

試験により得られた分析結果、測定結果、その他試験ノート等最終報告書の作成に用いた生データ、試験計画書、指示書、資料等は最終報告書と共に、試験委託者から通知を受けるまでの期間、当研究所資料保管室に保管する。

16. 備 考

16.1 試験に使用した主要な装置・機器

装置・機器

ガスクロマトグラフ	:	9 頁参照	
カールフィッシャー水分計	:	京都電子工業製	型 MKS-3P
pHメーター	:	東亜電波工業製	型 HM-40S
回転振とう機	:	6 頁参照	
フーリエ変換赤外分光光度計	:	島津製作所製	型 FTIR-8200PC