

最 終 報 告 書

エチレングリコールモノイソプロピルエーテル（被験物質番号
K-1268）の1-オクタノールと水との間の分配係数試験

財団法人 化学工業試験会
化学工業試験会研究所

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 エチレングリコールモノイソプロピルエーテル（被験物質番号
K-1268）の1-オクタノールと水との間の分配係数試験

試験番号 81268K

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10年6月18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 エチレングリコールモノイソプロピルエーテル（被験物質番号 K-1268）の
1-オクタノールと水との間の分配係数試験

試験番号 81268K

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10年 4月22日	平成10年 4月22日	平成10年 4月22日
試験実施状況	平成10年 4月23日	平成10年 4月28日	平成10年 4月28日
	平成10年 4月24日	平成10年 4月28日	平成10年 4月28日
生データ及び最終報告書	平成10年 6月 4日	平成10年 6月 4日	平成10年 6月 4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10年6月4日

信頼性保証部門責任者

[Redacted Signature]

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. 最終報告書の作成	3
10. 被験物質	4
11. 分配係数試験の実施	6
12. 試験結果	1 1
13. 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
14. 試資料の保管	1 3
15. 備 考	1 3
16. 表及び図の内容	1 4

付表及び付図

要 約

1. 試験の表題

エチレングリコールモノイソプロピルエーテル（被験物質番号 K-1268）の
1-オクタノールと水との間の分配係数試験

2. 分配係数試験

2.1 条 件

(1) 被験物質添加量 5. 14 mg

(2) 測 定 条 件

（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	30	25	15

(3) 試 験 温 度 $25 \pm 1^{\circ}\text{C}$

(4) 回転数及び時間 20回/分, 5分間

(5) 連 数 $n = 2$

2.2 分 析

ガスクロマトグラフィー（GC）による被験物質の分析

3. 試験結果

	測定値 (log Pow)		全 平 均
	a	b	
測定条件-1	0.02 (6.1)	0.08 (6.2)	0.04
測定条件-2	0.05 (6.3)	0.06 (6.3)	
測定条件-3	0.04 (6.3)	0.02 (6.4)	

() 内に水層の pH を示した。

最 終 報 告 書

試験番号 81268K

1. 表 題 エチレングリコールモノイソプロピルエーテル（被験物質番号 K-1268）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 (〒100-8901)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 (〒830-0023)福岡県久留米市中央町19-14
TEL (0942)34-1500
運営管理者 XXXXXXXXXX
4. 試験目的 K-1268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)” (July 27, 1995)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10年 4月22日

(2) 試験終了日 平成10年 5月14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. 最終報告書の作成

試験責任者

平成10年5月14日

氏名

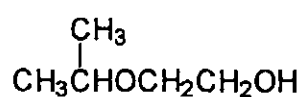
10. 被験物質

本報告書においてK-1268は、次の名称及び構造式等を有するものとする。

10.1 名 称 エチレングリコールモノイソプロピルエーテル

10.2 構造式等

構造式



分子式 $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}_2$

分子量 104.15

10.3 純 度^{*1}

(1) 被験物質 99.8%

(2) 不純物 水分 0.05%

被験物質濃度は不純物の含量を補正せずに表示した。

10.4 入手先、商品名、等級及びロット番号^{*1}

(1) 入 手 先

(2) 商 品 名

(3) 等 級

(4) ロット番号 PTE5550

*1 入手先添付資料による。

10.5 被験物質の確認

に記載の赤外吸収スペクトルと当研究所において測定したスペクトルが一致することを確認した (Fig. 7 参照)。

10.6 溶媒への溶解性

対水 100g/L以上 (25±1℃)

対1-オクタノール 10g/L以上 (25±1℃)

10.7 保管条件及び保管条件下での安定性

(1) 保管条件 冷蔵保存

(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)。

11. 分配係数試験の実施

11.1 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 37 mL共栓付ガラス製遠心管
遠心分離機	日立工機製 型20PR-52

(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
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 A062

(3) 環境条件

実施場所	441恒温室
試験温度	25±1℃

11.2 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。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。なお、1-オクタノール飽和水の使用時のpHは6.0であった。

11.3 被験物質溶液の調製

被験物質110mgを正確にはかりとり、水飽和1-オクタノールに溶解して被験物質溶液を調製し、濃度を測定した。被験物質の測定濃度は1030mg/L (9.87 mmol/L) であった。

11.4 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、11.2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11.3で調製した被験物質溶液5 mL (被験物質添加量5.14mg) 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。

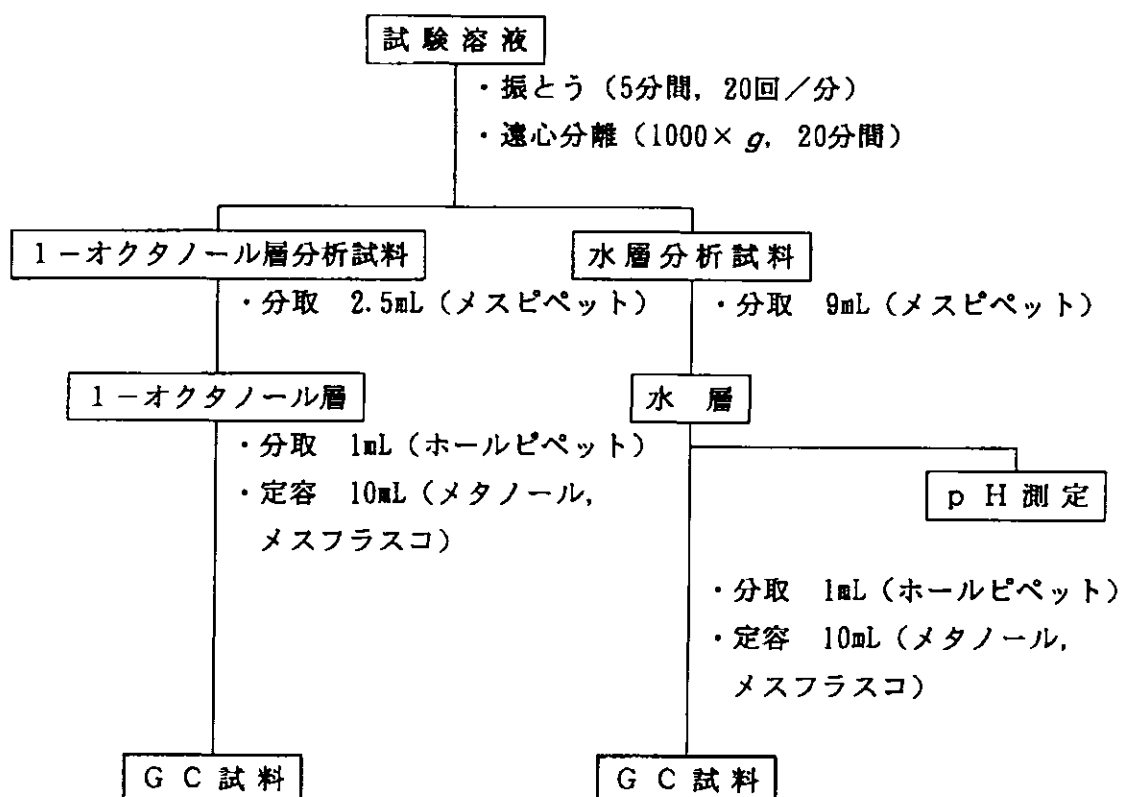
(単位 mL)

	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	30	25	15

11.5 試驗操作

11.4に基づき調製した試験溶液を以下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



11.6 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ガスクロマトグラフィーにより定量分析を行った。GC試料中の被験物質の濃度は標準溶液及びGC試料のクロマトグラム上で得られたピーク面積を比較し、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-オクタノール層分析において $210\mu\text{V}\cdot\text{sec}$ (被験物質濃度 0.28mg/L)、水層分析において $210\mu\text{V}\cdot\text{sec}$ (被験物質濃度 0.28mg/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-17A
検	出	器
検	出	器
器	温	度
度		220°C
カ	ラ	ム
		$40\text{m}\times 1.2\text{mmI.D.}$ ガラス製
液	相	G-300 膜厚 $1\mu\text{m}$
カ	ラ	ム
温	度	$70^{\circ}\text{C}(5\text{min})\rightarrow 130^{\circ}\text{C}(0\text{min})\rightarrow 190^{\circ}\text{C}(5\text{min})$
昇	温	速
度		$10^{\circ}\text{C}/\text{min}$ $20^{\circ}\text{C}/\text{min}$
試	料	導
入	部	温
度		220°C
キ	ャ	リ
ヤ	ー	ガ
ス		ス
		ヘリウム $20\text{mL}/\text{min}$
水	素	60kPa
空	気	50kPa
注	入	量
		$1\mu\text{L}$
感	度	
検	出	器
		レンジ 10^1

(2) 標準溶液の調製

分析試料中の被験物質濃度を求めるための標準溶液の調製は次のように行った。

被験物質 100mg を正確にはかりとり、メタノールに溶解して 1000mg/L の被験物質溶液を調製した。これを1-オクタノール層分析用としてメタノール/水飽和1-オクタノール(9/1 V/V)で希釈して 10mg/L 、水層分析用としてメタノール/1-オクタノール飽和水(9/1 V/V)で希釈して 10mg/L の標準溶液とした。

(3) 検量線の作成

(2)の標準溶液の調製と同様にして、5.0、10及び20mg/Lの標準溶液を調製した。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)。

11.7 ブランク試験

11.5の前処理及び11.6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)。

11.8 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。

11.9 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。

12. 試験結果

分配係数及び水層のpHは次のとおりであった。

12.1 分配係数測定結果

(Table-4 参照)

		$P_{ow} = \frac{C_o}{C_w}$	$P = \log P_{ow}$		
			測定値	平均値	全平均
測定条件 - 1	a	1.05	0.02	0.05	0.04 標準偏差 = 0.02 最大差 = 0.06
	b	1.20	0.08		
測定条件 - 2	a	1.13	0.05	0.05	
	b	1.14	0.06		
測定条件 - 3	a	1.09	0.04	0.03	
	b	1.05	0.02		

12.2 水層のpH測定結果

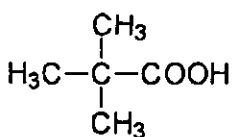
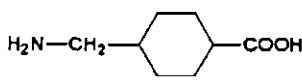
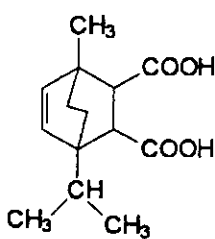
	測定値	
	試料 a	試料 b
測定条件-1	6.1	6.2
測定条件-2	6.3	6.3
測定条件-3	6.3	6.4

12.3 考 察

分解度試験において変化物として2-イソプロポキシエタン酸を生成したが、試料の入手が困難なため分配係数を計算値^{*2}で求めたところ、 $\log Pow = 0.424$ となった。

一方、類似物質であるピバル酸 (K-136 変化物, 2-0608, 63.3.24(135) 低)、トランス-4-アミノメチルシクロヘキサンカルボン酸 (K-1167, 9-0880, 6.3.16(191) 低) 及び1-イソプロピル-4-メチルビスシクロ[2.2.2]オクタ-5-エン-2,3-ジカルボン酸 (K-738 変化物, 62.2.9(129) 低) はいずれも低濃縮であった。従って、2-イソプロポキシエタン酸の濃縮性は極めて低いと推定される。

K-1268 変化物の類似物質

化合物名	構造式	分配係数	濃縮倍率	判定
ピバル酸	 <chem>CC(C)(C)C(=O)O</chem>	1.48 (フラスコ 振とう法)	1区: <0.2~1.2 2区: <2.3 脂質含有率: 4.2%	○
トランス-4-アミノメチルシクロ ヘキサンカルボン酸	 <chem>NCC1CCCCC1C(=O)O</chem>	-1.841 (計算値) ^{*2}	1区: <3.2 2区: <32 脂質含有率: 4.0%	○
1-イソプロピル-4-メチル ビスシクロ[2.2.2]オクタ-5- エン-2,3-ジカルボン酸	 <chem>CC(C)C1C(C(=O)O)C(C(=O)O)C2C1C(C)C=C2</chem>	2.613 (計算値) ^{*2}	1区: <0.3~0.5 2区: <3.1 脂質含有率: 4.7%	○

*2 Hansch-Leo method による。

13. 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。

14. 試資料の保管

14.1 被験物質

同一ロットの被験物質が分解度試験終了後にすでに保管されているため、本試験終了後には保管しない。

14.2 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。

15. 備 考

15.1 試験に使用した主要な装置・機器、試薬

装置・機器

ガスクロマトグラフ	:	9 頁参照	
	:	島津製作所製	型 GC-9A
カールフィッシャー水分計	:	京都電子工業製	型 MKS-3P
電子分析天びん	:	メトラー社製	型 AE-200
	:	ザルトリウス社製	型 1702MP8
pHメーター	:	東亜電波工業製	型 HM-60S
回転振とう機	:	6 頁参照	
遠心分離機	:	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

試薬

メタノール	:	和光純薬工業製	HPLC用
-------	---	---------	-------