

信 頼 性 保 証 書

財団法人 化学物質評価研究機構
久留米事業所

試験委託者 経済産業省

試験の表題 3-*tert*-ブチルフェノール（被験物質番号 K-81B）の 1-オクタノール
と水との間の分配係数試験（HPLC 法）

試験番号 805366

本最終報告書は、試験の方法、手順が正確に記載され、試験結果は生データを正確に反映していることを保証します。

なお、監査又は査察の結果については、下記の通り試験責任者及び運営管理者に報告しました。

監査又は査察内容	監査又は査察日	報告日 (試験責任者及び運営管理者)
試験計画書草案	2005 年 5 月 27 日	2005 年 5 月 27 日
試験計画書	2005 年 5 月 27 日	2005 年 5 月 27 日
試験計画書の変更	2005 年 6 月 3 日	2005 年 6 月 3 日
試験操作時	2005 年 5 月 30 日	2005 年 5 月 30 日
生データ、最終報告書草案	2005 年 6 月 2 日	2005 年 6 月 2 日
最終報告書	2005 年 6 月 3 日	2005 年 6 月 3 日

2005 年 6 月 3 日

信頼性保証部門責任者



陳 述 書

財団法人 化学物質評価研究機構
久留米事業所

試験委託者 経済産業省

試験の表題 3-*tert*-ブチルフェノール（被験物質番号 K-81B）の1-オクタノール
と水との間の分配係数試験（HPLC法）

試験番号 805366

上記試験は以下のGLPに従って実施したものです。

- (1) 「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準について」
（平成15年11月21日、薬食発第1121003号、平成15・11・17製局第3号、環境企発
第031121004号、平成17年4月1日 一部改正）に規定する「新規化学物質等に係る
試験を実施する試験施設に関する基準」

- (2) 「OECD Principles of Good Laboratory Practice」 (November 26, 1997)

また、本最終報告書は生データを正確に反映しており、試験データが有効であることを
確認しています。

2005 年 6 月 3 日

試験責任者



最 終 報 告 書

3-*tert*-ブチルフェノール（被験物質番号 K-81B）の1-オクタノールと水との間の
分配係数試験（HPLC法）

（試験番号：805366）

国 際 法 火 災
化学物質評価研究機構
残留物事業所

陳 述 書

財団法人 化学物質評価研究機構
久留米事業所

試験委託者 経済産業省

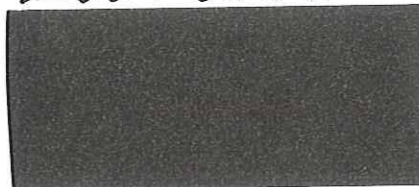
試験の表題 3-*tert*-ブチルフェノール（被験物質番号 K-81B）の1-オクタノール
と水との間の分配係数試験（HPLC法）

試験番号 805366

本最終報告書（電子媒体上のPDFファイル）は、上記試験の最終報告書を正確にコピー
したものです。

2005年 6月3日

運営管理者



目 次

	頁
表 題	1
試験委託者	1
試験施設	1
試験目的	1
試験法	1
適用 GLP	1
試験日程	2
試資料の保管	2
試験関係者	2
最終報告書の承認	2
要 約	3
1. 被 験 物 質	4
2. 分配係数試験の実施	6
3. 試験結果	8
4. 備 考	9

表 題	3- <i>tert</i> -ブチルフェノール（被験物質番号 K-81B）の1-オクタノールと水との間の分配係数試験（HPLC法）
試験委託者	経済産業省 （〒100-8901）東京都千代田区霞が関一丁目3番1号
試験施設	財団法人 化学物質評価研究機構 久留米事業所 （〒839-0801）福岡県久留米市宮ノ陣三丁目2番7号
試験目的	K-81B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。
試験法	本試験は以下の試験法に従って行った。 「OECD Guideline for the Testing of Chemicals」に定める “Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method (Guideline 117, April 13, 2004)”
適用 GLP	本試験は以下の基準を適用した。 (1) 「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準について」（平成15年11月21日、薬食発第1121003号、平成15・11・17製局第3号、環保企発第031121004号、平成17年4月1日 一部改正）に規定する「新規化学物質等に係る試験を実施する試験施設に関する基準」 (2) 「OECD Principles of Good Laboratory Practice」 (November 26, 1997)

試験日程

試験開始日	2005年 5月27日
実験開始日	2005年 5月30日
実験終了日	2005年 5月30日
試験終了日	2005年 6月 3日

試験資料の保管

(1) 被験物質

被験物質*1を保管用容器に入れ密栓後、品質低下を起こさないで安定に保存しうる期間、久留米事業所試料保管室に保管する。


*1 試験番号805363～805369及び205060の3-*tert*-ブチルフェノールについての一連の物理化学的性状試験及び分解度試験全体に対する保管用の被験物質として、試験番号205060にて保管する。

(2) 生データ、資料等

生データ、試験計画書、その他必要な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、久留米事業所資料保管室に保管する。

試験関係者

試験責任者


 所属 試験第三課

 試験担当者
 (分配係数試験の実施)



最終報告書の承認

2005年6月3日

試験責任者



要 約

試験の表題

3-*tert*-ブチルフェノール（被験物質番号 K-81B）の1-オクタノールと水との間の分配係数試験（HPLC法）

試験条件

(1) 被験物質濃度 約50mg/L

(2) 標準物質及び濃度

標準物質			濃度 (mg/L)
名称	純度(%)	log Pow値	
チオ尿素	98.0以上	デッドタイム測定用	10
ベンジルアルコール	99.8	1.1	10
アセトフェノン	98.5以上	1.7	10
安息香酸メチル	98.0以上	2.1	10
アリルフェニルエーテル	97	2.9	10
1,4-ジクロロベンゼン	>99.0	3.4	10
安息香酸フェニル	99	3.6	10

(3) 試験装置 高速液体クロマトグラフ
 溶離液：アセトニトリル/りん酸塩緩衝液（pH7.0）
 （1/1 V/V）

(4) 試験温度 25±1℃

試験結果

log Pow = 2.6

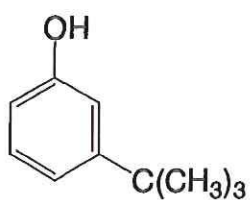
1. 被 験 物 質

本報告書においてK-81Bは、次の名称等を有するものとする。

1.1 名 称 3-*tert*-ブチルフェノール

1.2 構造式等

構造式



分子式 C₁₀H₁₄O

分子量 150.22

CAS番号 585-34-2

1.3 入手先、商品名、等級及びロット番号*2

(1) 入 手 先

(2) 商 品 名

(3) 等 級

(4) ロット番号

1.4 純 度*2

(1) 被 験 物 質 99.9% (GC)

(2) 不 純 物 残り0.1%は不明

被験物質は純度100%として取り扱った。

*2 入手先添付資料による。

1.5 被験物質の確認

独立行政法人 産業技術総合研究所の有機化合物スペクトルデータベースに記載の赤外吸収スペクトルと久留米事業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. 4参照)。

1.6 物理化学的性状*2

常温における性状	白色固体
融 点*2	42.6℃

*2 入手先添付資料による。

1.7 保管条件及び保管条件下での安定性

- (1) 保 管 条 件 冷暗所保存
- (2) 安定性確認 実験開始前及び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. 4参照)。

2. 分配係数試験の実施

被験物質は解離性物質（解離定数 $pK_a=10.12$ ）^{*3}であることから、非解離型（遊離酸）として測定するために pK_a 値より1以上小さい $pH7.0$ の緩衝液を用いて試験を行った。

*3 3-*tert*-ブチルフェノール（被験物質番号 K-81B）の水中における解離定数の測定（試験番号805369）による実測値。

2.1 測定条件

(1) 試験装置

機 器	高速液体クロマトグラフ 島津製作所製 LC-2010A
カ ラ ム	L-column ODS（化学物質評価研究機構製） 15cm×4.6mm I.D.
カ ラ ム 温 度	25℃
溶 離 液	アセトニトリル／りん酸塩緩衝液($pH7.0$) ^{*4} (1/1 V/V)
流 量	1.00mL/min
測 定 波 長	210nm (Fig.3参照)
注 入 量	10μL
出 力 レ ン ジ	1AU/V

*4 0.1mol/L水酸化ナトリウム148.15mL、0.1mol/Lりん酸二水素カリウム250mLを精製水で500mLに定容する。

(2) 環境条件

試 験 温 度	25±1℃
---------	-------

(3) 試験連数

n=2

2.2 試験操作

(1) 標準物質溶液の調製

標準物質としてベンジルアルコール、アセトフェノン、安息香酸メチル、アリルフェニルエーテル、1,4-ジクロロベンゼン及び安息香酸フェニルを使用した。デッドタイムの測定としてチオ尿素を使用した。これら6種の標準物質及びデッドタイム測定用のチオ尿素をそれぞれ約100mgはかりとり、アセトニトリルに溶解してそれぞれ約1000mg/Lの溶液を調製した。これらの溶液を混合し、アセトニトリル/りん酸塩緩衝液(pH7.0)*4 (1/1 V/V) で希釈して分配係数測定のための標準物質溶液とした。標準物質の各濃度は以下のとおりとした。

標準物質			濃度 (mg/L)
名称	純度(%)	log Pow値	
チオ尿素	98.0以上	デッドタイム測定用	10
ベンジルアルコール	99.8	1.1	10
アセトフェノン	98.5以上	1.7	10
安息香酸メチル	98.0以上	2.1	10
アリルフェニルエーテル	97	2.9	10
1,4-ジクロロベンゼン	>99.0	3.4	10
安息香酸フェニル	99	3.6	10

(2) 被験物質溶液の調製

被験物質約100mgをはかりとり、アセトニトリルに溶解して約1000mg/Lの被験物質溶液を調製した。これをアセトニトリル/りん酸塩緩衝液(pH7.0)*4 (1/1 V/V) で希釈して約50mg/Lの被験物質溶液とした。

(3) 回帰直線の作成

2.1及び2.2(1)の条件に従って測定したデッドタイム測定用物質及び標準物質の保持時間を求め、標準物質の保持係数(k)を以下の式に従って算出した。

標準物質の既知の分配係数と保持係数の対数から、最小二乗法により回帰直線を作成した(Table-1、Fig.1参照)。

$$k = \frac{t_R - t_0}{t_0}$$

t_R : 標準物質の保持時間
 t_0 : デッドタイム

$$\log \text{Pow} = a \times \log k + b$$

2.3 被験物質の測定

2.2(2)で調製した被験物質溶液を2.1(1)の試験装置に注入し、被験物質ピークの保持時間を測定した。

2.4 分配係数の算出

被験物質ピークの保持時間から保持係数を求め、2.2(3)に従って作成した直線回帰式を用いて被験物質の分配係数を算出した。これらの平均値を被験物質の分配係数とした。

分配係数は対数表示とした。

2.5 数値の取扱い

数値の丸め方は、JIS Z 8401:1999 規則Bの方法に従い、小数点以下1ケタで表示した。

3. 試験結果

3.1 測定条件における回帰直線の回帰式

$$\log \text{Pow} = 2.082 \times \log k + 1.360$$

3.2 分配係数

log Pow		
実測値		平均値
2.6	2.6	2.6

分配係数計算ソフト (Kowwin^{*5}) による予備推定値は、log Pow=3.42であった。

*5 Kowwin v1.66 (U.S Environmental Protection Agency)