

最 終 報 告 書

塩化ビニル（被験物質番号 K-28）の1-オクタノールと水との間の
分配係数試験

財団法人 化学品試験協会
化学品安全センター試験研究所

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	

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 塩化ビニル（被験物質番号 K-28）の1-オクタノールと水との間の
分配係数試験

試験番号 80028ⅡK

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8年6月21日

運営管理者



要 約

1. 試験の表題

塩化ビニル（被験物質番号 K-28）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 3.39 mg

(2) 測定条件 (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

(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	1.46 (6.2)	1.46 (6.3)	1.46
測定条件-2	1.47 (6.3)	1.46 (6.4)	
測定条件-3	1.44 (6.3)	1.48 (6.4)	

() 内に水層の pH を示した。

最 終 報 告 書

試験番号 80028IK

1. 表 題 塩化ビニル（被験物質番号 K-28）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 XXXXXXXXXX
4. 試験目的 K-28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 8年 5月 24日

(2) 試験終了日 平成 8年 6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 8年 6月 21日

作成者

10. 最終報告書の承認

試験責任者

平成 8年 6月 21日

氏名

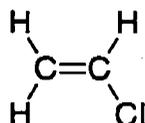
11. 被験物質

本報告書においてK-28は、次の名称及び構造式等を有するものとする。

11.1 名 称 塩化ビニル

11.2 構造式等

構造式



分子式 $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}$

分子量 62.50

11.3 純 度*1 99.5%以上

11.4 入手先、商品名、等級及びロット番号*1

(1) 入 手 先 XXXXXXXXXX

(2) 商 品 名 XXXXXXXXXX

(3) 等 級 XXXXXXXXXX

(4) ロット番号 HPY 1039

*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 2.8g/L (20±1℃)

対1-オクタノール 67.8g/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 常温保存

(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)。

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 A025

(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

真空補集瓶に、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、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、上方コックを閉じ、これを被験物質溶液とし、濃度を測定した。被験物質濃度の測定濃度は67.8 g/L (1.09 mol/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50 μ L (被験物質添加量3.39 mg) を添加した。なお、被験物質溶液の添加量は水飽和1-オクタノール層の数値に含まないものとした。測定は2連で実施した。

(単位 mL)

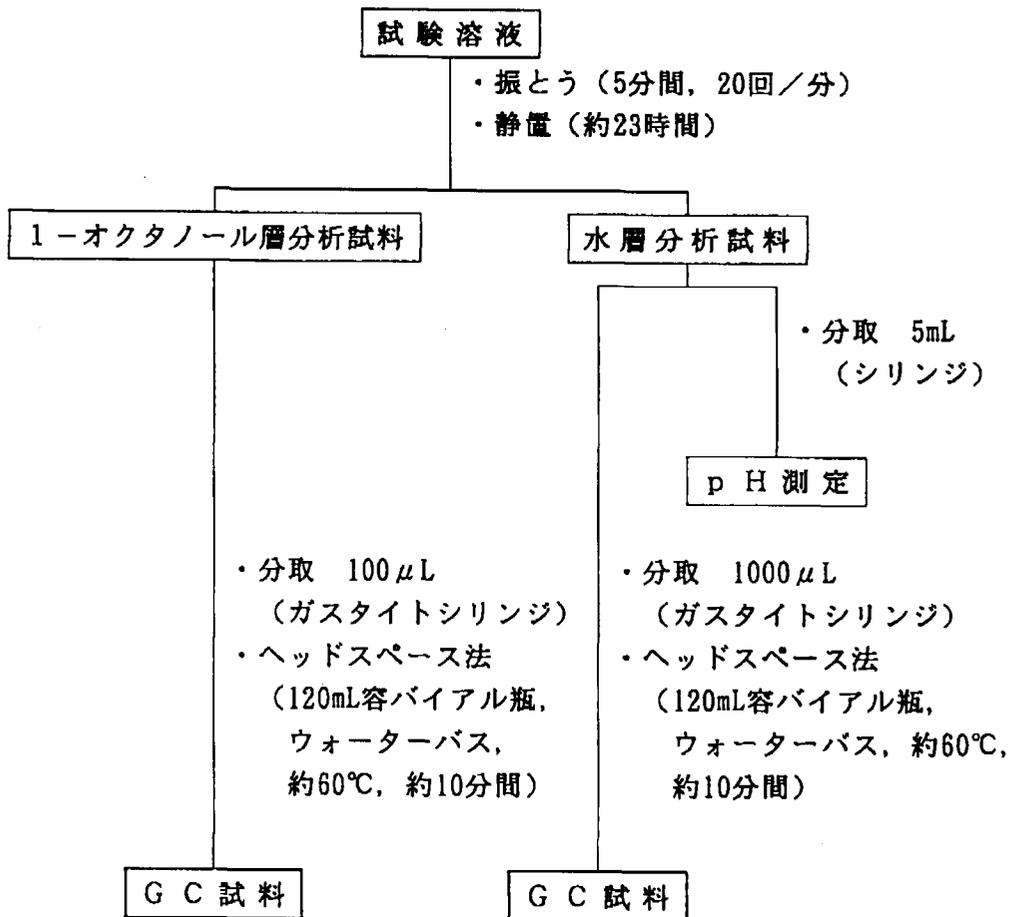
	測定条件-1	測定条件-2	測定条件-3
水飽和1-オクタノール層	5	10	20
1-オクタノール飽和水層	95	90	80

12.5 試験操作

- (1) 平衡容器に1-オクタノール飽和水を入れ、気泡が容器に入らないように注意して、セプタムで密栓をした。
- (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



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-オクタノール層分析において $500 \mu\text{V}\cdot\text{sec}$ (被験物質濃度 $2.7 \mu\text{g/L}$)、水層分析において $250 \mu\text{V}\cdot\text{sec}$ (被験物質濃度 $1.3 \mu\text{g/L}$) とした (Fig. 1, 4 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	水素炎イオン化検出器 (FID)
カ ラ ム	$30\text{m} \times 1.2\text{mm}\phi$ ガラス製
液 相	G-950 膜厚 $25 \mu\text{m}$
カ ラ ム 温 度	100°C
試料導入部温度	150°C
キャリアーガス	ヘリウム 20mL/min
水 素	60kPa
空 気	50kPa
注 入 量	$200 \mu\text{L}$
感 度	
検 出 器	レンジ 10°
記 録 計	1-オクタノール層分析 レンジ 25mV
	水層分析 レンジ 15mV

(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被験物質容器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速で流れるようにした。

②接続ゴム管より、ガスタイトシリンジで気体状態の被験物質 7.9 mL [$20.2\text{mg} = 7.9\text{mL} \times 2.555\text{mg/cm}^3$ (ガス密度, 25°C)] をゆっくり抜き取り、これを減圧にした内容積 1008 mL の真空捕集瓶に注入し、大気圧にもどすことにより、20.0 mg/L の被験物質ガスを調製した。

③1-オクタノール層分析用として、あらかじめガスタイトシリンジで 1.5 mL の空気を抜いた 120 mL 容バイアル瓶に、被験物質ガス 1.5 mL を注入して 250 $\mu\text{g/L}$ の標準ガスを調製した。また、水層分析用として、同様に 0.75 mL の空気を抜いた 120 mL 容バイアル瓶に、被験物質ガス 0.75 mL を注入して 125 $\mu\text{g/L}$ の標準ガスを調製した。

(3) 検量線の作成

(2) の標準ガスの調製と同様にして、1-オクタノール層分析用として 125、250 及び 500 $\mu\text{g/L}$ 、水層分析用として 62.5、125 及び 250 $\mu\text{g/L}$ 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)

計算結果は有効数字3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)

		$P_{ow} = \frac{C_o}{C_w}$	$P = \log P_{ow}$		
			測定値	平均値	全平均
測定条件-1	a	2.88×10^1	1.46	1.46	1.46 標準偏差 = 0.01 最大差 = 0.04
	b	2.88×10^1	1.46		
測定条件-2	a	2.92×10^1	1.47	1.47	
	b	2.91×10^1	1.46		
測定条件-3	a	2.78×10^1	1.44	1.46	
	b	3.01×10^1	1.48		

13.2 水層のpH測定結果

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

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

被験物質はガスであるため、当研究所試料保管室には保管しない。

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	
		島津製作所製	型 GC-14A
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	