

Japanチャレンジプログラム カテゴリーアプローチに関する情報

番号	カテゴリーを行う物質名	CAS No.	既存番号	略語
1	テトラデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩	4016-22-2	2-3065	C14-MES
2	ヘキサデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩	4016-24-4	2-3065	C16-MES
3	オクタデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩	4062-78-6	2-3065	C18-MES
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10				
備考				

カテゴリーの妥当性	<p>脂肪酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (Methyl Ester Sulfonate; 以下、MESと略す) は、脂肪酸メチルエステルの第2位の炭素にスルホン酸が付加した構造を有する陰イオン界面活性剤である。現在日本においてMESは主に脂肪酸鎖長の異なるヘキサデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C16-MES) とテトラデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C14-MES) の混合物として生産され、衣料用洗剤に使用されている。これまではC18の成分は工業的に生産されてこなかったが、界面活性剤としての性能等の面から、今後はオクタデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C18-MES) の生産量の増加が予測される。</p> <p>これら3物質は、疎水基に直鎖飽和脂肪酸炭化水素を有し、その炭素鎖長のみがC14、C16およびC18と異なる。MESと同様に疎水基に直鎖脂肪酸炭化水素を有する陰イオン系界面活性剤 (直鎖アルキルベンゼンスルホン酸 (LAS)、α オレフィンスルホン酸 (AOS) およびアルキルサルフェート (AS)) の環境中の分解や生体内の代謝は、炭素鎖長の違いにかかわらず脂肪酸炭化水素の末端がω酸化に続き炭素2分子単位でβ酸化が起こるという共通のメカニズムに基づくことが知られている。したがって、今回評価対象とする3物質についても、これらの陰イオン系界面活性剤と同様のメカニズムにしたがって環境中の分解、生体内での代謝を受けるものと推察され、環境中運命や毒性学的挙動における類似性が高いと考えられる。したがって、これら3物質をMES類という一つのカテゴリーとして取り扱うのが適切であると考ええる。</p> <p>MESについてのSIDS項目データについてはC14-MESおよびC16-MES (OECD SIAM16において“no further work”と評価済み) について整備されている。また、C18-MESのハザード評価及び考察においては、C14-MESおよびC16-MESのデータに加えて、化学構造や物性が類似した陰イオン界面活性剤 (直鎖アルキルベンゼンスルホン酸 (LAS)、アルキルサルフェート (AS)) の包括的なデータにより付加あるいは周辺情報が利用できる。</p> <p>したがって、これらカテゴリー物質および陰イオン界面活性剤の構造、毒性メカニズム、毒性学的な体内動態、代謝経路および毒性学的な類似性を基に、C18-MESの毒性評価を行うことが可能と考える。</p>
-----------	---

データマトリックス

○：信頼性のあるデータがある場合
T：試験を実施する場合
SAR：構造活性相関の情報がある場合
RA：リードアクロスする場合

物質名(略語入力可)		C14-MES	C16-MES	C18-MES
CAS No. 分子式 分子量		4016-22-2	4016-24-4	4062-78-6
		C15H29NaO5S	C17H33NaO5S	C19H37NaO5S
		344.444	386.523	400.55
	構造式	$\text{C}_{12}\text{H}_{25}-\text{CH}-\text{C}\begin{matrix} \text{O} \\ \parallel \\ \text{SO}_3\text{Na} \quad \text{O}-\text{CH}_3 \end{matrix}$	$\text{C}_{14}\text{H}_{29}-\text{CH}-\text{C}\begin{matrix} \text{O} \\ \parallel \\ \text{SO}_3\text{Na} \quad \text{O}-\text{CH}_3 \end{matrix}$	$\text{C}_{16}\text{H}_{33}-\text{CH}-\text{C}\begin{matrix} \text{O} \\ \parallel \\ \text{SO}_3\text{Na} \quad \text{O}-\text{CH}_3 \end{matrix}$
物理化学性状	融点	○	○	○
	沸点	○	○	○
	密度(比重)	○	○	○
	蒸気圧	RA	○	RA
	分配係数(log Kow)	○	○	○
	水溶解性(解離定数を含む)	○	○	○
環境運命と経路	光分解	○	○	○
	水中安定性	RA	○	RA
	環境区分間の移動	○	○	○
	分配	○	○	○
	好気性生分解性	○	○	○
	生物濃縮性	○	○	○
	その他			
生態毒性	魚への急性毒性	○	○	○
	水生無脊椎動物への急性毒性(例えばミジンコ)	○	○	RA
	水生植物への毒性(例えば藻類)	○	○	RA
	水生無脊椎動物への慢性毒性	○	○	○
	陸生植物への毒性			
	土壌生物への毒性			
	その他			
ヒト毒性	急性毒性	○	○	RA
	反復投与	○	○	RA
	刺激性／腐食性	○	○	
	感作性	○	○	
	遺伝子突然変異	○	○	RA
	染色体異常	○	○	RA
	<i>in vivo</i> 遺伝毒性			
	発がん性			
	受胎能			
	発生毒性	○	○	RA
	その他	○	○	RA

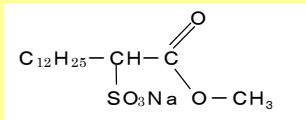
項目名 (同一の試験項目について複数の試験がある場合、当該項目行をコピー追加してください。)	データ入力欄
	黄色＝必須項目
	青＝任意項目
	紫＝一部の物質で必須項目

1. 一般情報

GENERAL INFORMATION

1.01 物質情報

SUBSTANCE INFORMATION

CAS番号	4016-22-2
物質名(日本語名)	テトラデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩
物質名(英名)	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
別名等	アルファスルホ脂肪酸メチルエステルナトリウム
国内適用法令の番号	2-3065
国内適用法令物質名	スルホ天然油脂脂肪酸メチルのナトリウム塩
OECD/HPV名称	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
分子式	C ₁₅ H ₂₉ NaO ₅ S
構造式	
備考	日本国内では、Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt (CAS:4016-24-4) との混合物として流通 (Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt is 70 - 80 % w/w, Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt is 30 - 20 % w/w)

1.02 安全性情報収集計画書／報告書作成者に関する情報

SPONSOR INFORMATION

機関名	ライオン株式会社
報告書作成日	2009年3月6日
備考	

1.1 一般的な物質情報

GENERAL SUBSTANCE INFORMATION

物質のタイプ	有機化合物
物質の色・におい・形状等の情報	淡黄色固体
物理的状態(20℃、1013hPa)	固体
純度(重量／重量%)	65～70%
出典	社内データ
備考	日本国内では、Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt (CAS:4016-24-4) との混合物として流通 (Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt is 70 - 80 % w/w, Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt is 30 - 20 % w/w)

1.2 不純物

IMPURITIES

CAS番号	4016-24-4
物質名称(IUPAC)	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt
国内適用法令の番号	2-3065
適用法令における名称	スルホ天然油脂脂肪酸メチルのナトリウム塩
含有率(%)	70 - 80 % w/w
出典	社内データ
備考	

1.3 添加物

ADDITIVES

CAS番号	
物質名称(IUPAC)	
国内適用法令の番号	
適用法令における名称	
含有率(%)	なし
出典	社内データ
備考	

1.4 別名
SYNONYMS

物質名-1	sodium 1-methyl 2-sulphonatotetradecanoate
物質名-2	
出典	NITE CHRIP
備考	

1.5 製造・輸入量
QUANTITY

製造・輸入量	10,000トン(取扱量オーダー)
報告年	2001
出典	既存化学物質安全性情報収集・発信プログラム スポンサーマニュアル(詳細版)(平成17年7月 厚生労働省、経済産業省、環境省)(参考7)国際的取組のない優先情報収集対象物質リスト
備考	

1.6 用途情報
USE PATTERN

主な用途情報	拡散的用途
工業的用途	その他:下欄のセルに記載
	日用家庭用品
用途分類	9クリーニング/洗剤と添加物-173洗浄剤
出典	社内データ
備考	

1.7 環境および人への暴露情報
SOURCES OF EXPOSURE

暴露に関する情報	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltは、閉鎖系で製造されている。製造現場でのサンプリング、分析、フィルター洗浄、ドラム詰め替え作業などで職業曝露の可能性はある。製造現場は、曝露を避けるため、換気設備により換気され、作業者は、ゴーグル、ゴム手袋、マスクを着用して作業している。 本物質は衣料用洗剤の界面活性剤として使用されており、2005年度および2006年度に代表的な河川7点における環境中濃度は、検出限界(0.03μg/mL)~0.08μg/L(最大)であった。
出典	社内データ
備考	

1.8 追加情報
ADDITIONAL INFORMATION

既存分類	
職業暴露限界	
廃棄方法	関連法規に従って適切に実施する。
文献調査の範囲と日付	Toxline、Medline、HSDB、Chemfinder、Beilstein、CAplus(以下レビュー)IUCLID、NITE CHRIP、文献調査の日付:2005年9月12日~2007年11月30日
出典	社内データ
備考	

2. 物理化学的性状
PHYSICAL CHEMICAL DATA

2.0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	別添資料を参照
-------------	---------

2.1 融点
MELTING POINT

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	純度:97.2w/w%(LC-MS)、製造者名:ライオン株式会社、Lot番号:003218
注釈	α-スルホミリスチン酸ナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 102 "融点/融点範囲(毛管法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2003
試験条件	検体約1gを乳鉢にてすりつぶし、毛細管(Melting Point Tubes(Mettler社製:ME-18552)に約3mmになるように詰めて測定。 測定機器:精密微量融点測定器(株式会社 石井商店製) 温度範囲:69.6~181.5℃ 昇温速度:1℃/1~2分 試験連数:1 70℃に温めたシリコンオイル中に毛細管を挿入し、サンプルが完全に融解し、固体を認めなくなった時の温度を融点とした。
結果	
融点: °C	167.8~175.6℃
分解: °C	いいえ

昇華: °C	いいえ
結論	167.8~175.6°C
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	文献1
備考	

2.2 沸点

BOILING POINT

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	純度: 97.2w/w%(LC-MS)、製造者名: ライオン株式会社、Lot番号: 003218
注釈	α -スルホミリスチン酸ナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 103 "沸点(示差走査熱量分析法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2003
試験条件	約5mgのサンプルをDSCパンに精密に量り取り、150°Cで10分保持後に1°C/分の昇温速度で150°C~350°Cの範囲で測定。 測定機器 ・TA Instruments DSC2910 Modulated DSC ・アルミパン P/N SSC000E031 Al15-CAPSULE
結果	
沸点: °C	
圧力	
分解: °C	はい
	約290°Cで分解
結論	約290°Cで分解
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	文献1
備考	

2.3 密度(比重)

DENSITY(RELATIVE DENSITY)

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	純度: 97.2w/w%(LC-MS)、製造者名: ライオン株式会社、Lot番号: 003218
注釈	α -スルホミリスチン酸ナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)
方法	JIS K7112(1999)、5.2B法(5.2ピクノメーター法)
GLP	いいえ
試験を行った年	2003
試験条件	恒温水槽: クールニックス: CL-150F COOLNIT(TAITEC社製) 50mLピクノメーターを用いて、25°C恒温水槽にて測定
結果	1.203g/cm ³
タイプ	密度
温度(°C)	25°C
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	JIS法に従って実施した非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	文献1
備考	

2.4 蒸気圧

VAPOUR PRESSURE

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	
注釈	
方法	MPBPWIN(v1.41)
GLP	
試験を行った年	2004
試験条件	

結果	
蒸気圧	2.87E-14 hPa
温度: °C	25
分解: °C	その他:下欄のセルに記載
結論	2.87E-14 hPa
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	キースタディ
出典	一般的に認められている計算方法及びカテゴリとしての評価
引用文献	社内データ
備考	文献1
備考	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltは、約290°Cで分解して沸点は持たず、融点が167.8~175.6°Cであることから、実質的に蒸気圧を有しないと考えられる。これは、Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltのカテゴリ物質であり、融点および沸点が同等であるHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS:4016-24-4)およびOctadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS:4062-78-6)についても同様と考えられる。本カテゴリ物質の中では、OECD SIDS (SIAM16)において、Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltの100°Cに於ける蒸気圧がOECD TG104に従って唯一実測されているが、その結果は<0.00017hPaであり、実質的な蒸気圧を有していない。このことから、Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltも融点以下の温度では実質的に蒸気圧を有さず、実測値からの推定による100°Cに於ける蒸気圧は、<0.00017hPa程度と考えられる。

2.5 分配係数(log Kow)

PARTITION COEFFICIENT

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	
注釈	
方法	KOWWIN v1.67
GLP	
試験を行った年	2005
試験条件	
結果	
Log Kow	3.08
温度: °C	
結論	3.08
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	キースタディ
出典	一般的に認められている計算方法
引用文献	社内データ
備考	文献1
備考	本物質はスルホン酸塩であり、水中では完全に解離している。また、バッファーを用いたとしても解離を抑制することはできず、非解離状態の分配係数を実測することはできない。よって、計算値を用いた。

2.6.1 水溶解性(解離定数を含む)

WATER SOLUBILITY & DISSOCIATION CONSTANT

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	純度: 97.2w/w%(LC-MS)、製造者名: ライオン株式会社、Lot番号: 003218
注釈	α-スルホミリスチン酸二ナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 105 "水への溶解性(フラスコ法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2003
試験条件	恒温水槽: クールニックス: CL-150F COOLNIT (TAITEC社製) 被験物質約10gを量り取り、全量で約25gになるように水を加えた。これを25°Cで1、2および3日間攪拌した。Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt水溶液を0.45μmのクロマトディスクで濾過し、濾液中の被験物質をHPLCで測定し、検量線から濃度を算出した。
結果	
水溶解度	209 g/L (1日後) 197 g/L (2日後) 193 g/L (3日後)
温度: °C	25
pH	4.87 (1日後) 4.84 (2日後) 4.84 (3日後)
pH測定時の物質濃度	209 g/L (4.87, 1日後) 197 g/L (4.84, 2日後) 193 g/L (4.84, 3日後)

結論	209 g/L
注釈	3日後で測定結果が漸減傾向を示し、わずかに加水分解したと考えられた。1日後の測定値を溶解度として採用。
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	文献1
備考	
解離定数	
試験物質	
同一性	
方法	
温度: °C	
GLP	
試験条件	
試験を行った年	
結果	
結論	強酸であるスルホン酸のナトリウム塩であるため、水中では完全に解離する
注釈	
信頼性スコア	選択してください
	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献	
備考	

2.6.2 表面張力 SURFACE TENSION

2.7 引火点(液体) FLASH POINT(LIQUIDS)

2.8 自己燃焼性 (固体／気体) AUTO FLAMMABILITY(SOLIDS/GASES)

2.9 引火性 FLAMMABILITY

2.10 爆発性 EXPLOSIVE PROPERTIES

2.11 酸化性 OXIDISING PROPERTIES

2.12 酸化還元ポテンシャル OXIDATION/REDUCTION POTENTIAL

2.13 その他の物理化学的性状に関する情報 ADDITIONAL INFOMATION

3. 環境運命と経路 ENVIRONMENTAL FATE AND PATHWAYS

3.0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	別添資料を参照
-------------	---------

3.1 安定性 STABILITY

3.1.1. 光分解 PHOTODEGRADATION

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	
注釈	
方法	AOPWIN v.1.91
タイプ	間接光分解
GLP	
試験を行った年	2006
光源と波長(nm)	
太陽光強度に基づいた相対強度	
物質のスペクトル	
試験条件	光照射時間:12時間/日
結果	

物質濃度	
温度(°C)	
直接光分解	
半減期t1/2	
分解度(%)と時間	
量子収率 (%)	
間接光分解	
増感剤(タイプ)	OHラジカル
増感剤濃度	1.5×10^6 OH/cm ³
速度定数	$16.4039E-12$ cm ³ /molecule・秒
半減期t1/2	t1/2=0.652日
分解生成物	不明
結論	t1/2=0.652日
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法
出典	国による情報提供
引用文献	
備考	

3.1.2. 水中安定性(加水分解性)

STABILITY IN WATER

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	
注釈	
方法	
GLP	
試験を行った年	
試験条件	
結果	
設定濃度	
実測濃度	
所定時間後の分解度(%)、pH、温度	
半減期	
分解生成物	その他:下欄のセルに記載
結論	
注釈	
信頼性スコア	選択してください
	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献	文献2
備考	OECD SIDS(SIAM16)において、Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltのカテゴリ物質であるHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt(CAS:4016-24-4)は、水中安定性試験によって5日間は水中で安定であることが確認されている。Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltとHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltは、炭素鎖長にC14とC16の違いがあるのみであり構造から判断してTetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltの水中安定性は、Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltと同様と判断され、5日間は安定であると考えられる。

3.1.3. 土壌中安定性

STABILITY IN SOIL

3.2. モニタリングデータ(環境)

MONITORING DATA(ENVIRONMENT)

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	
注釈	
方法	LC/MS
測定タイプ(地点)	その他:下欄のセルに記載 多摩川(羽村堰、原橋、田園調布堰)、江戸川(金町)、荒川(治水橋、笹目橋)、淀川(枚方大橋)
媒体	水

結果	測定年	2004年				2005年			2006年
	測定月	6月	9月	12月	3月	6月	9月	12月	3月
	羽村堰	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND
	多摩川原橋	0.03	0.03	0.04	0.06	0.04	0.02	ND	ND
	田園調布堰	ND	ND	0.11	0.16	ND	ND	0.02	0.03
	金町	ND	ND	0.05	0.20	ND	ND	0.04	0.03
	治水橋	ND	ND	0.14	0.24	ND	ND	0.11	0.05
	笹目橋	0.03	0.09	0.35	0.33	0.08	0.04	0.03	ND
	枚方大橋	ND	ND	0.02	ND	ND	ND	0.05	0.01
	※実測値(μg/L)								
結論	幾何平均値:0.03μg/L(最大値:0.35、95%タイル:0.21)								
注釈	定量下限:0.03μg/L。平均値、95%タイルの算出:定量下限以下の場合は定量下限値の半量で検出されたとして算出								
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり								
	キースタディ								
信頼性の判断根拠	日本石鹼洗剤工業会による環境モニタリングに合わせた採水・測定しており、ピアレビューされた学術誌に掲載されている								
出典	社内データ								
引用文献	文献3								
備考									

3.3. 移動と分配

TRANSPORT AND DISTRIBUTION

3.3.1 環境区分間の移動

TRANSPORT BETWEEN ENVIRONMENTAL COMPARTMENTS

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt			
CAS番号	4016-22-2			
純度等				
注釈				
方法	Fugacity model III			
結果				
媒体	大気－水－土壌－底質			
環境分布予測と媒体中濃度 (levelIII/III)	分布(%) 大気 水 土壌 底質 0.688 21 77.9 0.409			
結論	分布(%) 大気 水 土壌 底質 0.688 21 77.9 0.409			
注釈	EPISUIT(version 3.12)			
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり			
	キースタディ			
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法			
出典	国による情報提供			
引用文献				
備考				

3.3.2 分配

DISTRIBUTION

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt			
CAS番号	4016-22-2			
純度等				
注釈				
媒体	水－空気			
方法	ヘンリー定数			
試験条件				
結果	$9.24 \times 10^{-5} \text{ Pa} \times \text{m}^3/\text{mole}$			
結論	$9.24 \times 10^{-5} \text{ Pa} \times \text{m}^3/\text{mole}$			
注釈	HENRYWIN v1.90、2006年、25°C			
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり			
	キースタディ			
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法			
出典	国による情報提供			
引用文献				
備考				

3.4 好気性生分解性

AEROBIC BIODEGRADATION

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	91.05
注釈	水分: 8.95%
方法	OECD Test Guideline 301F "易分解性" 改良法
培養期間	14日間
植種源	活性汚泥: 神奈川県下水道公社酒匂川左岸下水道終末処理場返送汚泥を採取し、採取日当日に使用した。
GLP	いいえ
試験を行った年	1999
試験条件	実環境中濃度を考慮して試験濃度を下げたため、試験精度の低下を避けるため試験液量を900mLとした。 分析法: 固相抽出-HPLC(RI)法
試験物質濃度	10mg/L
汚泥濃度	30mg/L
培養温度 °C	25±1°C
対照物質および濃度(mg/L)	なし
分解度測定方法	閉鎖系酸素消費量測定装置による生物化学的酸素要求量(BOD)の測定 全有機炭素分析法による溶存有機炭素(DOC)の分析 HPLCによる被験物質の分析
分解度算出方法	算術平均
結果	
最終分解度(%) 日目	75% 14日目
分解速度-1	1日目 1%
分解速度-2	2日目 13%
分解速度-3	3日目 26%
分解速度-4	5日目 33%
分解生成物	検出されなかった
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果	全有機炭素分析法によるDOC測定: 96%(14日) HPLCによる被験物質測定: 100%(3日)
対象物質の7, 14日目の分解度	実施せず
その他	
結論	易分解性
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	キースタディ
出典	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
引用文献	社内データ
備考	

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	不明
注釈	不明
方法	Esso controlled nutrient procedure
培養期間	27
植種源	下水処理場から入手した活性汚泥
GLP	不明
試験を行った年	不明
試験条件	
試験物質濃度	40ppm
汚泥濃度	不明
培養温度 °C	25
対照物質および濃度(mg/L)	シュウ酸ナトリウム、50ppm、30 μ L
分解度測定方法	炭素消費量をBeckman carbomaceous analyzerを測定
分解度算出方法	不明
結果	
最終分解度(%) 日目	(%)(日目)
分解速度-1	74%(27日目)
分解速度-2	
分解速度-3	
分解速度-4	
分解生成物	不明
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果	不明
対象物質の7, 14日目の分解度	不明
その他	
結論	分解度74%(27日目)
注釈	
信頼性スコア	3 信頼性なし
	選択してください

信頼性の判断根拠	試験条件不明
出典	
引用文献	文献4
備考	

3.5. BOD-5、CODまたはBOD-5／COD比
BOD-5、COD OR RATIO BOD-5/COD

3.6 生物濃縮性
BIOACCUMULATION

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	
注釈	
方法	BCFWIN v2.15
生物種	
暴露期間（日）	
曝露濃度	
排泄期間	
GLP	
試験を行った年	2005
分析方法	
試験条件	
被験物質溶液	
対照物質	
対照物質名及び分析方法	その他:下欄のセルに記載
試験方式／実施	
結果	
死亡率／行動	
脂質含有量（%）	
試験中の被験物質濃度	
濃縮係数 (BCF)	70.79
取込／排泄定数	
排泄時間	
代謝物	
その他の観察	
結論	70.79
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に用いられている計算方法
出典	社内データ
引用文献	文献1
備考	

項目名 (同一の試験項目について複数の試験がある場合、当該項目行をコピー追加してください。)	データ入力欄
	黄色＝必須項目
	青＝任意項目
	紫＝一部の物質で必須項目

4-0 カテゴリー評価

4-1 魚への急性毒性

ACUTE TOXICITY TO FISH

試験物質	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt				
同一性	4016-22-2、純度:99.4%(w/w)、製造者名:ライオン株式会社				
方法	JIS K0102 "工場排水試験法"(1991年)				
GLP	いいえ				
試験を行った年	1991				
魚種、系統、供給者	魚 種: <i>Oryzias latipes</i> (ヒメダカ) 系 統: ー 供給者: 観賞魚販売業者より購入				
エンドポイント	96hr-LC50				
試験物質の分析の有無	なし				
試験物質の分析方法					
結果の統計解析手法	暴露開始後24、48、72及び96時間の各濃度区における死亡数と供試個体数から死亡率(%)を求め、単回帰分析によりLC50を算出した。				
試験条件					
試験魚の月齢、体長、体重	月 齢: 不明 体 長: 約2.5cm 体 重: 0.2～0.3g				
試験用水量あたりの魚体重	不明				
参照物質での感受性試験結果	実施せず				
じゅん化条件	じゅん化期間: 20日間 飼育水の種類: 希釈水 水温: 約23℃ 餌料: 市販観賞魚用飼料				
希釈水源	曝気処理による脱塩素水道水				
希釈水の化学的性質	硬度: 55～62mg/L (CaCO3換算) pH : 7.2～7.3 DO : 飽和濃度付近				
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	蒸留水を用いて1000mg/L試験原液を200mL調製し、2L希釈水に必要量を順次添加して試験液を調製				
試験物質の溶液中での安定性	アルキル基炭素数が異なるHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS:4016-24-4)の水中安定性(加水分解性)検討結果では、水中で5日間安定だったことより、当該試験物質も同様に安定と判断				
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	使用せず				
暴露容器	容器: 塩化ビニル製容器 蓋: なし 通気: なし 試験水量: 2L				
暴露期間	96時間				
試験方式	半止水				
換水率/換水頻度	換水頻度: 48時間当たり1回				
連数、1連当たりの魚数	連数: 1容器/試験区 連当り魚数: 7尾/試験区				
影響が観察された少なくとも1濃度区及び対照区における水質	記載なし				
試験温度範囲	22±2℃(設定値)				
照明の状態	室内照明、明暗周期の記載なし				
平均測定濃度の計算方法	濃度測定を実施していない				
結果					
設定濃度	0(対照)、3.2、5.6、10、18及び32mg/L				
実測濃度	濃度測定を実施していない				
生物学的影響観察	該当なし				
累積死亡率の表	死亡個体数(死亡率)				
	設定濃度 (mg/L)	24h	48h	72h	96h
	対照	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	3.2	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	5.6	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	10	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	18	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	32	7(100)	7(100)	7(100)	7(100)
統計的結果	記載なし				

注釈	記載なし
対照区における死亡率	0%
異常反応	観察されなかった
その他の観察結果	
結論	
結果(96h-LC50)	設定濃度に基づく、急性毒性値 LC50(96h): 24mg/L LC0(96h): 18mg/L LC100(96h): 32mg/L
信頼性スコア	2. 制限付で信頼性あり
キースタディ	キースタディ
信頼性の判断根拠	JIS法に従って実施された、非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	文献5
備考	

4-2 水生無脊椎動物への急性毒性(例えばミジンコ)

ACUTE TOXICITY TO AQUATIC INVERTEBRATES (DAPHNIA)

試験物質	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	CAS番号: 4016-22-2、純度: 91.05%(w/w)、水分率: 8.95%、製造者名: ライオン株式会社
方法	OECD Test Guideline 202 "急性遊泳阻害および繁殖試験"(1984年)
GLP	いいえ
試験を行った年	2000
生物種、系統、供給者	オオミジンコ(<i>Daphnia magna</i>) 起源: 財団法人 化学品検査協会 入手年: 1995年
エンドポイント	遊泳阻害の48h-EC50
試験物質の分析の有無	なし
試験物質の分析方法	
結果の統計解析手法	各濃度区における暴露開始後24及び48時間のミジンコ遊泳阻害数と供試個体数から遊泳阻害率(%)を求め、ロジット法によりEC50を算出した。
試験条件	
試験生物の起源、前処理、繁殖方法	1995年財団法人化学品検査協会より導入し、継代飼育により維持
参照物質での感受性試験結果	実施していない
試験開始時の時間齢	産仔後24時間以内の幼体
希釈水源	活性炭処理による脱塩素水道水
希釈水の化学的性質	硬度: 50~65mg/L (CaCO ₃ 換算) pH: 7.2~7.6 DO: 飽和濃度付近
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	蒸留水を用いて10000mg/L試験原液を調製し、50mL希釈水に必要な量を順次添加して試験液を調製した
試験物質の溶液中での安定性	アルキル基炭素数が異なるHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS: 4016-24-4)の水中安定性(加水分解性)検討結果では、水中で5日間安定だったことより、当該試験物質も同様に安定と判断
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	使用せず
暴露容器	50mLの試験溶液を100mL ビーカーに入れた。(開放)
暴露期間	48時間
試験方式	止水
連数、1連当たりの試験生物数	連数: 4連/濃度区 生物数: 20頭/濃度区(1連につき5頭で1濃度区20頭)
対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質	記載なし
試験温度範囲	20±1°C
照明の状態	室内照明、16時間点灯/8時間消灯
平均測定濃度の計算方法	濃度測定を実施していない
結果	
設定濃度	5.6, 10, 18, 32, 56, 100mg/L
実測濃度	濃度測定を実施していない
遊泳阻害数	遊泳阻害濃度(設定値) (mg/L) EC0 = 10 EC50 = 17.2 EC100 = 32.0

累積遊泳阻害数の表	遊泳阻害数(遊泳阻害率)		
	設定濃度 (mg/L)	24h	48h
	対照	0(0)	0(0)
	5.6	0(0)	0(0)
	10	0(0)	0(0)
	18	0(0)	15(75)
	32	7(35)	20(100)
	56	20(100)	20(100)
	100	20(100)	20(100)
注釈	試験結果に影響を与える事項は観察されなかった		
対照区における反応は妥当か	はい		
対照区における反応の妥当性の考察	48時間の試験期間において、対照区におけるミジンコの遊泳阻害率は0%であり、試験成立条件を満足した		
結論			
結果(48h-EC50)	17.2mg/L(設定濃度)		
信頼性スコア	2. 制限付で信頼性あり		
キースタディ	キースタディ		
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した、非GLP試験		
出典	社内データ		
引用文献	文献1		
備考			

4-3 水生植物への毒性(例えば藻類)

TOXICITY TO AQUATIC PLANTS e. g. ALGAE

試験物質	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt		
同一性	CAS番号: 4016-22-2		
	純度: 99.4%(w/w)		
	製造者名: ライオン株式会社		
方法	OECD Test Guideline 201"藻類生長阻害試験"(1984年)		
GLP	いいえ		
試験を行った年	1997		
生物種、系統、供給者	生物種: <i>Selenastrum capricornutum</i> (<i>Pseudokircheneriella subcapitata</i>)		
	系統: NIES-35		
	入手先: 独立行政法人 国立環境研究所		
エンドポイント	72h- ErC_{50} (生長速度法)		
毒性値算出に用いたデータの種類	生長速度		
試験物質の分析の有無	なし		
試験物質の分析方法			
結果の統計解析手法	ロジット法		
試験条件			
試験施設での藻類継代培養方法	C培地を用いて無菌的に継代培養		
	なお、試験培地のOECD培地が貧栄養のため、継代にはC培地を使用した		
藻類の前培養の方法及び状況	通気栓つき300mL三角フラスコ、振とう培養(72hr)		
参照物質での感受性試験結果	実施していない		
希釈水源	蒸留水		
培地の化学的性質	調製培地(OECD培地)を使用		
	pH8.3(±0.1)(設定値)		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	被験物質の100mgをとり、100mLのOECD培地を加え、振とう溶解し、1000mg/L試験原液を調製し、100mL調製培地(OECD培地)に必要な量を順次添加して試験液を調製した		
試験物質の溶液中での安定性	アルキル基炭素数が異なるHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS:4016-24-4)の水中安定性(加水分解性)検討結果では、水中で5日間安定だったことより、当該試験物質も同様に安定と判断		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	使用せず		
暴露容器	通気栓つき300mL三角フラスコに、100mLの試験液を入れて振とう培養		
暴露期間	72時間		
試験方式	止水		
連数	3容器/試験区		
各濃度区の少なくとも1連における試験開始時と終了時の水質	pH		
		開始時	終了時
	対照	7.34	7.74
	5.6	7.34	7.72
	10	7.34	7.82
	18	7.34	7.82
	32	7.34	7.78
	56	7.34	7.90
	100	7.34	7.91
試験温度範囲	23±2°C		
照明の状態	4000luxで連続照射		
平均測定濃度の計算方法	濃度測定を実施していない		
結果			
設定濃度	0(対照)、5.6、10、18、32、56及び100mg/L		

実測濃度	濃度測定を実施していない
細胞密度	暴露期間中の細胞濃度 設定濃度 連 細胞濃度 (104 × cells/mL) (mg/L) 0h 24h 48h 72h 対照 1.6±0.1 10.0 ±0.5 56.6±3.8 368±90.5 5.6 1.51±0.04 7.87±0.83 51.6±3.70 304±63.6 10 1.43±0.04 7.79±0.55 55.1±4.25 308±33.1 18 1.45±0.03 6.69±1.19 69.5±3.99 295±1.64 32 1.48±0.04 11.2 ±1.13 87.2±13.9 475±67.1 56 1.46±0.07 8.05±0.73 51.9±1.65 262±25.7 100 1.48±0.03 6.34±2.03 39.7±12.4 188±39.4
生長阻害率(%)	生長速度に基づく生長阻害率 設定濃度 生長速度平均±SD 阻害率(%) (mg/L) μ (0-72h) 対照 0.0751±0.0034 — 5.6 0.0735±0.0019 2.1 10 0.0746±0.0017 0.7 18 0.0738±0.0008 1.7 32 0.0801±0.0023 -6.7 56 0.0720±0.0010 4.1 100 0.0671±0.0028 10.7
各濃度区における生長曲線	・対照区における細胞密度は72時間の培養で230倍に増殖し、試験条件下で正常な生長を示した。 ・最低濃度区 (5.6mg/L) では72時間の培養で192倍に増殖し、対照区と同程度の生長を示した。 ・最高濃度区 (100mg/L) では72時間の培養で127倍の増殖であり、生長阻害がみられた。 ・上記以外の4濃度区 (10、18、32、56mg/L) では72時間培養で179～321倍の増殖であった。
その他観察結果	結果に影響を与える事項は観察されなかった
注釈	
対照区での生長は妥当か	はい
対照区における反応の妥当性の考察	対照区における細胞密度は72時間の培養で230倍に増殖し、妥当性の基準である16倍を越えた。
結論	
結果 (ErC50)	72h-ErC50 > 100mg/L (設定濃度)
結果 (NOEC)	設定濃度に基づく、無影響量 72h-NOEC: 56mg/L
信頼性スコア	2. 制限付で信頼性あり
キースタディ	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した、非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	文献1
備考	

4-4 微生物への毒性 (例えばバクテリア)

TOXICITY TO MICROORGANISMS e. g. BACTERIA

4-5 水生生物への慢性毒性

CHRONIC TOXICITY TO AQUATIC ORGANISMS

A. 魚への慢性毒性

CHRONIC TOXICITY TO FISH

B. 水生無脊椎動物への慢性毒性

CHRONIC TOXICITY TO AQUATIC INVERTEBRATES

試験物質	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	CAS: 4016-22-2、純度: 97.2%(w/w)、不純物: α-スルホミリスチン酸ニナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル、0.1%(w/w)メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)、製造元: ライオン株式会社、Lot.No.: 003218
方法	OECD Test Guideline 211 "オオミジンコ繁殖試験" (1998年)
GLP	はい
試験を行った年	2003
試験生物種	オオミジンコ (<i>Daphnia magna</i>)
試験物質の分析の有無	あり
試験物質の分析方法	HPLC(定量下限10mg/L: 標準液)
エンドポイント	繁殖率
結果の統計解析手法	Moving Average法
試験条件	
助剤使用の有無	なし
助剤の種類、濃度、助剤対照区の有無	

試験温度	19.9～20.2℃(平均値算出せず)																																																																																																																																	
pH	7.7～8.1(平均値算出せず)																																																																																																																																	
硬度	36.8～46.8mg/L (CaCO3換算)																																																																																																																																	
試験生物の情報	英国Sheffield大学より分譲されたクローンAの子孫で、財団法人 化学物質評価研究機構久留米事業所にて継代飼育している成体より産出された幼体を用いた。また、試験系の再現性を確認するために実施(2003年11月25日に実施)した試験生物による基準物質(ニクロム酸カリウム、試薬特級、和光純薬工業株式会社)の急性遊泳阻害試験の48時間EC50は0.255mg/Lであり、この値は財団法人 化学物質評価研究機構久留米事業所における基準物質の48時間EC50の規定範囲(平均±2×標準偏差:0.113～0.346mg./L)であった。幼体は15日令の成体群が産出した生後24時間以内の幼体を用いた。給餌はミジンコ1頭当たり <i>Chlorella vulgaris</i> を0.1～0.2mgC(有機炭素含量)/日の割合で1日に1回行った。																																																																																																																																	
希釈水源	脱塩素水道水																																																																																																																																	
希釈水の化学的性質	pH:6.7(24℃)、残留塩素0.02mg/L以下																																																																																																																																	
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	必要量の被験物質を秤量し、試験用水に溶解させて1000mg/Lの試験原液を調製した。試験原液の調製は純度(97.2%)補正して行った。この試験原液を必要量分取し、調製容器に入れた試験用水に添加後、攪拌して試験液を調製した。調製は試験区毎に行い、これを各試験容器に分割した。																																																																																																																																	
試験物質の溶液中での安定性	アルキル基炭素数が異なるHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS:4016-24-4)の水中安定性(加水分解性)検討結果では、水中で5日間安定だったことより、当該試験物質も同様に安定と判断																																																																																																																																	
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	使用せず																																																																																																																																	
暴露期間	21日間																																																																																																																																	
暴露容器	80mLの試験液を100mLガラスビーカーに入れた。(開放)																																																																																																																																	
連数、1連当たりの試験生物数	10頭/試験区(1頭×10試験容器)																																																																																																																																	
照明	室内灯により、15-20μE・m ⁻² ・s ⁻¹ を超えない光強度(測定値:6.64μE・m ⁻² ・s ⁻¹)で16時間明／8時間暗																																																																																																																																	
対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質	水温、DO、pH及び硬度については、ミジンコの試験環境として適正範囲であった。 水温:20.0-20.2(対照区)、19.9-20.1(試験区) pH:7.7-8.1(対照区)、7.7-8.1(試験区) 溶存酸素(mg/L):8.3-9.0(対照区)、8.3-9.2(試験区) 硬度(mgCaCO3/L):37.0-46.4(対照区)、36.8-46.8(試験区)																																																																																																																																	
平均測定濃度の計算方法	算術または加算平均																																																																																																																																	
結果																																																																																																																																		
設定濃度	0.5、1.0、2.0、4.0、8.0 mg/L																																																																																																																																	
実測濃度	0.473、0.992、1.97、4.10、8.47 mg/L																																																																																																																																	
実測濃度の詳細	<table><tr><td>設定濃度 (mg/L)</td><td colspan="7">測定濃度(mg/L)</td></tr><tr><td></td><td>0日^{a)}</td><td>2日^{b)}</td><td>8日^{a)}</td><td>10日^{b)}</td><td>14日^{a)}</td><td>16日^{b)}</td><td>平均</td></tr><tr><td>対照</td><td>n.d.</td><td>n.d.</td><td>n.d.</td><td>n.d.</td><td>n.d.</td><td>n.d.</td><td>n.d.</td></tr><tr><td>0.5</td><td>0.501</td><td>0.369</td><td>0.505</td><td>0.453</td><td>0.538</td><td>0.452</td><td>0.473</td></tr><tr><td>1.0</td><td>0.906</td><td>1.07</td><td>1.00</td><td>0.973</td><td>1.06</td><td>0.949</td><td>0.992</td></tr><tr><td>2.0</td><td>1.97</td><td>1.80</td><td>2.05</td><td>1.93</td><td>2.12</td><td>1.95</td><td>1.97</td></tr><tr><td>4.0</td><td>4.09</td><td>3.80</td><td>3.90</td><td>4.03</td><td>4.43</td><td>4.34</td><td>4.10</td></tr><tr><td>8.0</td><td>8.52</td><td>8.30</td><td>8.16</td><td>8.29</td><td>8.98</td><td>8.57</td><td>8.47</td></tr></table> n.d.:Not detected, a):新規に調製した試験液、b):48時間暴露後の試験液	設定濃度 (mg/L)	測定濃度(mg/L)								0日 ^{a)}	2日 ^{b)}	8日 ^{a)}	10日 ^{b)}	14日 ^{a)}	16日 ^{b)}	平均	対照	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	0.5	0.501	0.369	0.505	0.453	0.538	0.452	0.473	1.0	0.906	1.07	1.00	0.973	1.06	0.949	0.992	2.0	1.97	1.80	2.05	1.93	2.12	1.95	1.97	4.0	4.09	3.80	3.90	4.03	4.43	4.34	4.10	8.0	8.52	8.30	8.16	8.29	8.98	8.57	8.47																																																																	
設定濃度 (mg/L)	測定濃度(mg/L)																																																																																																																																	
	0日 ^{a)}	2日 ^{b)}	8日 ^{a)}	10日 ^{b)}	14日 ^{a)}	16日 ^{b)}	平均																																																																																																																											
対照	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.																																																																																																																											
0.5	0.501	0.369	0.505	0.453	0.538	0.452	0.473																																																																																																																											
1.0	0.906	1.07	1.00	0.973	1.06	0.949	0.992																																																																																																																											
2.0	1.97	1.80	2.05	1.93	2.12	1.95	1.97																																																																																																																											
4.0	4.09	3.80	3.90	4.03	4.43	4.34	4.10																																																																																																																											
8.0	8.52	8.30	8.16	8.29	8.98	8.57	8.47																																																																																																																											
累積遊泳阻害数	<table><tr><td colspan="2">親ミジンコの累積死亡数</td></tr><tr><td>実測濃度 (mg/L)</td><td>暴露時間(日)</td></tr><tr><td></td><td>0 ----- 21</td></tr><tr><td>対照</td><td>0 ----- 0</td></tr><tr><td>0.473</td><td>0 ----- 0</td></tr><tr><td>0.992</td><td>0 ----- 0</td></tr><tr><td>1.97</td><td>0 ----- 0</td></tr><tr><td>4.10</td><td>0 ----- 0</td></tr><tr><td>8.47</td><td>0 ----- 0</td></tr></table>	親ミジンコの累積死亡数		実測濃度 (mg/L)	暴露時間(日)		0 ----- 21	対照	0 ----- 0	0.473	0 ----- 0	0.992	0 ----- 0	1.97	0 ----- 0	4.10	0 ----- 0	8.47	0 ----- 0																																																																																																															
親ミジンコの累積死亡数																																																																																																																																		
実測濃度 (mg/L)	暴露時間(日)																																																																																																																																	
	0 ----- 21																																																																																																																																	
対照	0 ----- 0																																																																																																																																	
0.473	0 ----- 0																																																																																																																																	
0.992	0 ----- 0																																																																																																																																	
1.97	0 ----- 0																																																																																																																																	
4.10	0 ----- 0																																																																																																																																	
8.47	0 ----- 0																																																																																																																																	
累積産仔数	<table><tr><td colspan="17">21日間における親ミジンコ1頭当りの平均累積産仔数</td></tr><tr><td>実測濃度 (mg/L)</td><td>0-7</td><td>8</td><td>9</td><td>10</td><td>11</td><td>12</td><td>13</td><td>14</td><td>15</td><td>16</td><td>17</td><td>18</td><td>19</td><td>20</td><td>21</td></tr><tr><td>対照</td><td>0-0</td><td>18.1</td><td>18.1</td><td>18.1</td><td>41.8</td><td>43.5</td><td>43.5</td><td>43.5</td><td>52.7</td><td>68.0</td><td>68.0</td><td>68.0</td><td>96.9</td><td>96.9</td><td>126</td></tr><tr><td>0.473</td><td>0-0</td><td>17.0</td><td>17.0</td><td>17.0</td><td>36.9</td><td>38.4</td><td>38.4</td><td>53.0</td><td>60.6</td><td>60.6</td><td>66.9</td><td>93.6</td><td>93.6</td><td>93.6</td><td>126</td></tr><tr><td>0.992</td><td>0-0</td><td>11.0</td><td>11.0</td><td>11.0</td><td>23.6</td><td>27.5</td><td>27.5</td><td>35.8</td><td>41.8</td><td>43.3</td><td>52.8</td><td>65.8</td><td>68.9</td><td>68.9</td><td>88.2</td></tr><tr><td>1.97</td><td>0-0</td><td>13.6</td><td>13.6</td><td>13.6</td><td>25.8</td><td>25.8</td><td>25.8</td><td>39.1</td><td>39.4</td><td>39.4</td><td>57.3</td><td>75.2</td><td>75.2</td><td>75.4</td><td>108</td></tr><tr><td>4.10</td><td>0-0</td><td>8.5</td><td>8.5</td><td>8.5</td><td>20.7</td><td>20.9</td><td>20.9</td><td>33.3</td><td>38.4</td><td>38.4</td><td>50.5</td><td>74.7</td><td>74.7</td><td>74.7</td><td>106</td></tr><tr><td>8.47</td><td>0-0</td><td>1.4</td><td>1.4</td><td>1.4</td><td>5.6</td><td>5.6</td><td>5.6</td><td>6.2</td><td>6.2</td><td>6.2</td><td>23.7</td><td>23.7</td><td>28.4</td><td>30.0</td><td>42.9</td></tr></table>	21日間における親ミジンコ1頭当りの平均累積産仔数																	実測濃度 (mg/L)	0-7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	対照	0-0	18.1	18.1	18.1	41.8	43.5	43.5	43.5	52.7	68.0	68.0	68.0	96.9	96.9	126	0.473	0-0	17.0	17.0	17.0	36.9	38.4	38.4	53.0	60.6	60.6	66.9	93.6	93.6	93.6	126	0.992	0-0	11.0	11.0	11.0	23.6	27.5	27.5	35.8	41.8	43.3	52.8	65.8	68.9	68.9	88.2	1.97	0-0	13.6	13.6	13.6	25.8	25.8	25.8	39.1	39.4	39.4	57.3	75.2	75.2	75.4	108	4.10	0-0	8.5	8.5	8.5	20.7	20.9	20.9	33.3	38.4	38.4	50.5	74.7	74.7	74.7	106	8.47	0-0	1.4	1.4	1.4	5.6	5.6	5.6	6.2	6.2	6.2	23.7	23.7	28.4	30.0	42.9
21日間における親ミジンコ1頭当りの平均累積産仔数																																																																																																																																		
実測濃度 (mg/L)	0-7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21																																																																																																																			
対照	0-0	18.1	18.1	18.1	41.8	43.5	43.5	43.5	52.7	68.0	68.0	68.0	96.9	96.9	126																																																																																																																			
0.473	0-0	17.0	17.0	17.0	36.9	38.4	38.4	53.0	60.6	60.6	66.9	93.6	93.6	93.6	126																																																																																																																			
0.992	0-0	11.0	11.0	11.0	23.6	27.5	27.5	35.8	41.8	43.3	52.8	65.8	68.9	68.9	88.2																																																																																																																			
1.97	0-0	13.6	13.6	13.6	25.8	25.8	25.8	39.1	39.4	39.4	57.3	75.2	75.2	75.4	108																																																																																																																			
4.10	0-0	8.5	8.5	8.5	20.7	20.9	20.9	33.3	38.4	38.4	50.5	74.7	74.7	74.7	106																																																																																																																			
8.47	0-0	1.4	1.4	1.4	5.6	5.6	5.6	6.2	6.2	6.2	23.7	23.7	28.4	30.0	42.9																																																																																																																			
対照区における反応は妥当か	はい																																																																																																																																	
生理的影響	試験結果に影響を与える事項はなかった																																																																																																																																	

試験の妥当性	対照区の21日間での親ミジンコ1頭当たりの平均累積産仔数は126頭であり、試験成立条件である60頭以上の基準を満たした。また、結果に変動を与える物理的影響もなく試験は妥当と判断した。
注釈	
結論	
結果 (EC50)	EC50:6.81mg/L(実測濃度)
結果 (NOEC、LOEC)	親ミジンコの1頭当たりの累積産仔数に及ぼす21日間の最大無作用濃度 (NOEC) : 4.10mg/L(実測)
信頼性スコア	1. 制限なく信頼性あり
キースタディ	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施したGLP試験
出典	社内データ
引用文献	文献1
備考	

4-6 陸生生物への毒性

TOXICITY TO TERRESTRIAL ORGANISMS

A. 陸生植物への毒性

TOXICITY TO TERRASTRIAL PLANTS

B. 土壌生物への毒性

TOXICITY TO SOIL DWELLING ORGANISMS

C. 他の非哺乳類陸生種(鳥類を含む)への毒性

TOXICITY TO OTHER NON-MAMMALIAN TERRESTRIAL SPECIES (INCLUDING AVIAN)

4-6-1底生生物への毒性

TOXICITY TO SEDIMENT DWELLING ORGANISMS

4-7 生物学的影響モニタリング(食物連鎖による蓄積を含む)

BIOLOGICAL EFFECTS MONITORING (INCLUDING BIOMAGNIFICATION)

4-8 生体内物質変換と動態

BIOTRANSFORMATION AND KINETICS

4-9 追加情報

ADDITIONAL INFORMATION

項目名 (同一の試験項目について複数の試験がある場合、当該項目行をコピー追加してください。)	データ入力欄
	黄色＝必須項目
	青＝任意項目
	紫＝一部の物質で必須項目

5-0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	<p>脂肪酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (Methyl Ester Sulfonate; 以下、MESと略す) は、脂肪酸メチルエステルの第2位の炭素にスルホン酸が付加した構造を有する陰イオン界面活性剤である。現在日本においてMESは主に脂肪酸鎖長の異なるヘキサデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C16-MES) とテトラデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C14-MES) の混合物として生産され、衣料用洗剤に使用されている。これまではC18の成分は工業的に生産されてこなかったが、界面活性剤としての性能等の面から、今後はオクタデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C18-MES) の生産量の増加が予測される。</p> <p>これら3物質は、疎水基に直鎖飽和脂肪酸炭化水素を有し、その炭素鎖長のみがC14、C16およびC18と異なる。</p> <p>MESと同様に疎水基に直鎖脂肪酸炭化水素を有する陰イオン系界面活性剤 (直鎖アルキルベンゼンスルホン酸 (LAS)、αオレフィンスルホン酸 (AOS) およびアルキルサルフェート (AS)) の環境中の分解や生体内の代謝は、炭素鎖長の違いにかかわらず脂肪酸炭化水素の末端がω酸化に続き炭素2分子単位でβ酸化が起こるという共通のメカニズムに基づくことが知られている。したがって、今回評価対象とする3物質についても、これらの陰イオン系界面活性剤と同様のメカニズムにしたがって環境中の分解、生体内での代謝を受けるものと推察され、環境中運命や毒性学的挙動における類似性が高いと考えられる。したがって、これら3物質をMES類という一つのカテゴリーとして取り扱うのが適切であると考ええる。</p> <p>MESについてのSIDS項目データについてはC14-MESおよびC16-MES (OECD SIAM16において“no further work”と評価済み) について整備されている。また、C18-MESのハザード評価及び考察においては、C14-MESおよびC16-MESのデータに加えて、化学構造や物性が類似した陰イオン界面活性剤 (直鎖アルキルベンゼンスルホン酸 (LAS)、アルキルサルフェート (AS)) の包括的なデータにより付加的あるいは周辺情報が利用できる。</p> <p>したがって、これらカテゴリー物質および陰イオン界面活性剤の構造、毒性メカニズム、毒性学的な体内動態、代謝経路および毒性学的な類似性を基に、C18-MESの毒性評価を行うことが可能と考える。</p>
-------------	---

5-1 トキシコキネティクス、代謝、分布

TOXICOKINETICS, METABOLISM, and DISTRIBUTION

5-2 急性毒性

ACUTE TOXICITY

A. 急性経口毒性

ACUTE ORAL TOXICITY

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	97.2%(w/w)、Lot番号:003218
注釈	α -スルホミリスチン酸二ナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)
方法	
方法／ガイドライン	OECD423
GLP適合	はい
試験を行った年	2003
試験系(種／系統)	Rat Crj: CD(SD)
性別(雄:M、雌:F)	MF
投与量	2000, 300, 0
各用量群(性別)の動物数	群あたり:雄3匹、雌3匹、総計18匹
溶媒(担体)	蒸留水
投与経路	強制経口投与
観察期間(日)	14
その他の試験条件	
統計学的処理	全群の平均体重および標準偏差を求めた
結果	
各用量群での死亡数	2000mg/kg: 雄2/3、雌3/3 300mg/kg: 雄0/3、雌0/3
臨床所見	<p>2,000mg/kg投与群において、投与直後に雄雌とも各1例に流涎が観察された。投与約1時間後より下痢が雄雌全例に発現した。投与約4時間後には雌の2例に、投与約7時間後には雄の全例にうずくまり姿勢が認められた。生存した雄の1例は、投与翌日に軟便および排泄物による体表の汚れが認められたが、投与2日後には回復した。</p> <p>300mg/kg投与群では、軟便が投与直後に雄の2例、投与約7時間後に雄の1例、雌の1例に認められ、投与約7時間後に雌の全例に体表の汚れが認められた。いずれも投与翌日には認められなかった。</p> <p>媒体対照群のいずれの動物においても観察期間中の一般状態に異常は認められなかった。</p>

剖検所見	所見なし
その他	2,000mg/kg投与群において、雌は投与約4時間後までに1例、約7時間後までに全例が死亡した。雄では、投与約7時間後の観察で死亡例は認められなかったが、投与翌日の観察時に2例の死亡が確認された。 300mg/kg投与群および媒体対照群においては、死亡例は認められなかった。
結論	
LD50値又はLC50値	M:1000 F:500
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等	2000mg/kgにおいて雄が1例生存し、雌が全例死亡した。300mg/kgにおいては全例が生存しており、OECD423の分類基準にしたがってLD50を算出
注釈	ライオン株式会社安全性評価センター
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	社内データ
引用文献(元文献)	文献6
備考	

B. 急性吸入毒性

ACUTE INHALATION TOXICITY

C. 急性経皮毒性

ACUTE DERMAL TOXICITY

D. 急性毒性(その他の投与経路)

ACUTE TOXICITY, OTHER ROUTES

5-3 腐食性/刺激性

CORROSIVENESS/IRRITATION

A. 皮膚刺激/腐食

SKIN IRRITATION/CORROSION

試験物質名	混合物(Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt:Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt=70:30)
CAS番号	4016-22-2
純度等	混合物として、62.4%
注釈	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt:約43.7%、残分(メチル硫酸ナトリウム、ミリスチン酸メチル、パルミチン酸メチル、水分等):約37.6%
pH	不明
方法	
方法/ガイドライン	皮膚一次刺激性試験(化粧品安全性評価指針)
GLP適合	いいえ
試験を行った年	1992
試験系(種/系統)	Guinea Pig Hartley
性別(雄:M、雌:F)	F
投与量	0.03mL, 20, 10, 5, 2%(w/v)
各用量群(性別)の動物数	2
溶媒(担体)	蒸留水
投与経路	開放適用 経皮(毛刈りした健常皮膚に被験物質を塗布)
観察期間(日)	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7
その他の試験条件	<p>動物の週齢:6週齢 用量:20, 10, 5, 2% 投与容量:0.03mL/2×2cm 判定基準:Draize法(下記)</p> <p>紅斑および痂皮</p> <p>紅斑なし -----0 紅斑極弱い(わずかにみとめられる程度) -----1 紅斑明瞭 -----2 紅斑中程度～強度 -----3 紅斑極めて強度～結痂 -----4</p> <p>浮腫</p> <p>浮腫なし -----0 浮腫形成極く軽度(わずかに認められる程度) -----1 浮腫形成軽度 -----2 浮腫形成中程度(膨隆1mm) -----3 浮腫形成強度(膨隆1mm以上、検体適用部位以外にも広がる) -----4</p>
統計学的処理	
結果	

一次刺激スコア	処置濃度(%)				
	観察 (時間)	20	10	5	2
	24	1.0	0.5	0.5	0
	48	1.0	0.5	0	0
	72	1.0	0.5	0	0
	96	1.0	0.5	0	0
	120	1.0	0	0	0
	144	0.5	0	0	0
	168	0	0	0	0
皮膚反応等					
その他					
結論					
皮膚刺激性	あり				
皮膚腐食性	なし				
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター				
信頼性	2 制限付きで信頼性あり				
信頼性の判断根拠	ガイドラインに従わない、非GLP試験であるが、科学的に皮膚刺激性評価が可能				
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ				
引用文献(元文献)	文献2				
備考					

試験物質名	混合物(Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt:Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt=80:20)
CAS番号	4016-22-2
純度等	混合物として、61.2%
注釈	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt:約48.9%、残分(メチル硫酸ナトリウム、ミリスチン酸メチル、パルミチン酸メチル、水分等):約38.8%
pH	不明
方法	
方法/ガイドライン	皮膚一次刺激性試験(化粧品安全性評価指針)
GLP適合	いいえ
試験を行った年	1992
試験系(種/系統)	Guinea Pig Hartley
性別(雄:M、雌:F)	F
投与量	0.03mL, 20, 10, 5, 2%(w/v%)
各用量群(性別)の動物数	2
溶媒(担体)	蒸留水
投与経路	開放適用 経皮(毛刈りした健常皮膚に被験物質を塗布)
観察期間(日)	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7
その他の試験条件	<p>動物の週齢:6週齢 用量:20, 10, 5, 2% 投与容量:0.03mL/2×2cm 判定基準:Draize法(下記) 紅斑および痂皮 紅斑なし -----0 紅斑極弱い(わずかにみとめられる程度) -----1 紅斑明瞭 -----2 紅斑中程度～強度 -----3 紅斑極めて強度～結痂 -----4</p> <p>浮腫 浮腫なし -----0 浮腫形成極く軽度(わずかに認められる程度) -----1 浮腫形成軽度 -----2 浮腫形成中程度(膨隆1mm) -----3 浮腫形成強度(膨隆1mm以上、検体適用部位以外にも広がる) -----4</p>
統計学的処理	
結果	

	処置濃度(%)				
	観察 (hr)	20	10	5	2
一次刺激スコア	24	0.5	0.5	1.0	0
	48	0.5	0.5	0.5	0
	72	0.5	0.5	0.5	0
	96	0.5	0.5	0.5	0
	120	0	0	0.5	0
	144	0	0	0	0
	168	0	0	0	0
皮膚反応等					
その他					
結論					
皮膚刺激性	あり				
皮膚腐食性	なし				
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター				
信頼性	2 制限付きで信頼性あり				
信頼性の判断根拠	ガイドラインに従わない、非GLP試験であるが、科学的に皮膚刺激性評価が可能				
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ				
引用文献(元文献)	文献2				
備考					

B. 眼刺激／腐食
EYE IRRITATION/CORROSION

5-4 皮膚感作
SKIN SENSITISATION

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt		
CAS番号	4016-22-2		
純度等	97.2%(w/w)、Lot番号:003218		
注釈	α-スルホミリスチン酸二ナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)		
方法			
方法／ガイドライン	OECD406		
試験のタイプ	in vivo		
GLP適合	はい		
試験を行った年	2003		
試験系(種／系統)	Guinea Pig Hartley		
性別(雄:M、雌:F)	M		
投与量	5, 2%		
各用量群(性別)の動物数	10		
溶媒(担体)	蒸留水		
投与経路	経皮		
観察期間(日)	1, 2		
その他の試験条件	動物の週齢:6週齢 アジュバント使用 皮膚感作条件 ・皮内注射濃度:0.1% ・48hrクローズドパッチ:5% 惹起条件 ・24hrクローズドパッチ:5.2% 観察時間 ・24、48時間		
統計学的処理			
結果			
試験結果	皮膚反応なし		
その他			
結論			
感作性	陰性		
注釈	Centre de Recherches Biologiques (CERB)		
信頼性	1 制限なく信頼性あり		
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。		
出典	社内データ		
引用文献(元文献)	文献6		
備考			

5-5 反復投与毒性
REPEATED DOSE TOXICITY

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt																																		
CAS番号	4016-22-2																																		
純度等	97.2%(w/w)、Lot番号:003218																																		
注釈	α-スルホミリスチン酸ニナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)																																		
方法																																			
方法／ガイドライン	OECD422																																		
GLP適合	はい																																		
試験を行った年	2003																																		
試験系(種／系統)	Rat Crj: CD(SD)																																		
性別(雄:M、雌:F)	MF																																		
投与量	M: 740、360、175、0 F: 1039、497、249、0 飼料中の被験物質濃度: 1.2、0.6、0.3、0%																																		
各用量群(性別)の動物数	12																																		
溶媒(担体)	選択してください NMF粉末飼料																																		
投与経路	混餌投与																																		
対照群に対する処理	溶媒投与、試験群と同様に処理																																		
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)	56																																		
投与頻度	混餌による自由摂取																																		
回復期間(日)	無																																		
試験条件	動物の週齢: 10(投与開始時) 投与日数: 雄56日、雌41-45日																																		
統計学的処理	Dunnet																																		
結果																																			
体重、体重増加量	統計学的有意差なし																																		
摂餌量、飲水量	摂餌量: 雄: 360mg/kg(0.6%)の摂餌量が投与 11～15日に有意に増加(p<0.05) 雌: 1039mg/kg(1.2%)の摂餌量が、投与4～8日(p<0.05)、投与8～11日(p<0.01)、投与11～15日(p<0.05)に有意に増加 摂水量: 雄の740mg/kg(1.2%)の摂水量が有意に増加(p<0.01) 試験責任者は、これらの変化に毒性学的意味はないとしている																																		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	所見なし																																		
眼科学的所見(発生率、重篤度)	実施せず																																		
血液学的所見(発生率、重篤度)	雌の1039mg/kg(1.2%)において、有意なプロトロンビン時間の延長およびフィブリノーゲンの低値をみとめた <table><tr><td>投与量(mg/kg)</td><td>0</td><td>249</td><td>497</td><td>1039</td></tr><tr><td>プロトロンビン時間(秒)</td><td>12.6±0.3</td><td>13.0±0.3</td><td>13.1±0.5</td><td>13.5±0.4**</td></tr><tr><td>フィブリノーゲン</td><td>351 ±61</td><td>316±25</td><td>301±47</td><td>277±23*</td></tr></table> *:p<0.05、**:p<0.01、NOAEL推定根拠					投与量(mg/kg)	0	249	497	1039	プロトロンビン時間(秒)	12.6±0.3	13.0±0.3	13.1±0.5	13.5±0.4**	フィブリノーゲン	351 ±61	316±25	301±47	277±23*															
投与量(mg/kg)	0	249	497	1039																															
プロトロンビン時間(秒)	12.6±0.3	13.0±0.3	13.1±0.5	13.5±0.4**																															
フィブリノーゲン	351 ±61	316±25	301±47	277±23*																															
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	雌雄の0.6%以上の処置群において、トリグリセライド(TG)の有意な低下をみとめた(NOEL設定根拠) <table><tr><td colspan="5">投与量(mg/kg)</td></tr><tr><td>雄</td><td>0</td><td>175</td><td>360</td><td>740</td></tr><tr><td>TG</td><td>39±17</td><td>24±9</td><td>16±4**</td><td>18±6**</td></tr></table> <table><tr><td colspan="5">投与量(mg/kg)</td></tr><tr><td>雌</td><td>0</td><td>249</td><td>497</td><td>1039</td></tr><tr><td>TG</td><td>49±24</td><td>24±22</td><td>17±6*</td><td>20±10*</td></tr></table> *:p<0.05、**:p<0.01、NOEL推定根拠 なお、クレアチニンの低下が0.3%投与群の雄(p<0.05)に、総たん白質の低下が0.6%投与群の雄(p<0.05)に認められたが、用量との関連はなく、変動範囲内の変化と試験責任者は考察している。					投与量(mg/kg)					雄	0	175	360	740	TG	39±17	24±9	16±4**	18±6**	投与量(mg/kg)					雌	0	249	497	1039	TG	49±24	24±22	17±6*	20±10*
投与量(mg/kg)																																			
雄	0	175	360	740																															
TG	39±17	24±9	16±4**	18±6**																															
投与量(mg/kg)																																			
雌	0	249	497	1039																															
TG	49±24	24±22	17±6*	20±10*																															
尿検査所見(発生率、重篤度)	所見なし																																		
死亡数(率)、死亡時間	なし																																		
剖検所見(発生率、重篤度)	肉眼所見において、被験物質投与に起因すると考えられる毒性学的変化は認められなかった。																																		

臓器重量	雄 740mg/kg投与群(1.2%): 精巣の絶対重量および相対重量の増加 雌 1039mg/kg投与群(1.2%): 肝臓の絶対/相対重量の増加(NOAE設定根拠)、副腎の絶対/相対重量の低下 胸腺、心臓、脾臓の絶対重量の低下、腎臓の相対重量の増加
	雄 <絶対重量> 0 175 360 740 精巣 3.23±0.27 3.31±0.20 3.32±0.33 3.50±0.25* <相対重量>(g/100gBW) 精巣 0.68±0.06 0.69±0.05 0.69±0.05 0.76±0.05* 雌 <絶対重量> 0 249 497 1039 肝臓 10.34±0.86 10.28±0.96 10.43±0.69 11.83±1.48**(NOAE設定根拠) 副腎 88±9 84±6 79±8* 71±7** 胸腺 239±33 246±83 214±67 178±47* 心臓 0.97±0.08 0.99±0.09 0.91±0.05 0.87±0.05* 脾臓 0.70±0.1 0.78±0.14 0.67±0.07 0.59±0.08* <相対重量> 0 249 497 1039 肝臓(g/100gBW) 3.46±0.31 3.47±0.15 3.64±0.23 4.20±0.36**(NOAE設定根拠) 副腎(mg/100gBW) 29±3 28±2 28±3 25±3** 腎臓(g/100gBW) 0.71±0.06 0.75±0.05 0.74±0.04 0.79±0.05**
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	雌 1039mg/kg(1.2%) 肝臓: 軽微な小葉中心性肝細胞肥大(5/5)、軽微な核の大小不同(1/5例)、軽微な肝細胞の限局性壊死(1/5) 胸腺: 軽微(1/5)又は軽度(1/5)な萎縮投与群 【肝臓】 投与量(mg/kg) 0 249 497 1039 小葉中心性肝細胞肥大 ± 0/5 0/5 0/5 5/5 核の大小不同 ± 0/5 0/5 0/5 1/5 限局性壊死 ± 0/5 0/5 0/5 1/5 【胸腺】 萎縮 ± 0/5 0/5 0/5 1/5 + 0/5 0/5 0/5 1/5 軽度な副腎の皮質細胞肥大が対照群3/5例及び雌1039mg/kg群の2/5例、軽微又は軽度な脾臓の髓外造血が対照群及び1.2 %投与群で各5例、中等度な大腿骨及び胸骨における造血細胞の増数が対照群及び1.2 %投与群で各5例にみられたが、妊娠・分娩に伴う特殊条件下に伴う変化であると考えられ、被験物質投与との関連はないと試験責任者は判断している。
実際に摂取された量	雄: 175、360、740mg/kg/日 雌: 249、497、1039mg/kg/日
用量反応性	あり
注釈	
結論	
NOEL (NOEL)	雄: > 740 雌: 497
LOEL (LOEL)	雄: > 740 雌: 1039
NOEL/LOELの推定根拠	雌の血液学的検査におけるPTの延長とフィブリノーゲンの減少。
雌雄のNOEL(LOEL)の違い等	雌におけるNOELが雄よりも低い。理由不明
注釈	ボゾリサーチセンター
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	社内データ
引用文献(元文献)	文献6
備考	

5-6 in vitro 遺伝毒性

GENETIC TOXICITY IN VITRO

A. 遺伝子突然変異

GENE MUTATION

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	97.2%(w/w)、Lot番号: 003218
注釈	α-スルホミリスチン酸ニナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)
方法	
方法/ガイドライン	OECD471

GLP適合	はい
試験を行った年	2003
細胞株又は検定菌	S. typhimurium 4種(TA 1535 & TA 1537 & TA 98 and TA 100) E.coli WP2 uvr A
代謝活性化(S9)の有無	有
試験条件	<p><用量> µg/plate 代謝活性化によらない場合 TA98, TA1537, TA100 : 78.1, 39.1, 19.5, 9.77, 4.88, 2.44, 1.22 TA1535 : 19.5, 9.77, 4.88, 2.44, 1.22, 0.610, 0.305 E.coli WP2 uvr A : 5000, 2500, 1250, 625, 313, 156, 78.1 代謝活性化による場合 TA98 : 1250, 625, 313, 156, 78.1, 39.1, 19.5 TA1537, TA100, TA1535: 313, 156, 78.1, 39.1, 19.5, 9.77, 4.88 E.coli WP2 uvr A : 5000, 2500, 1250, 625, 313, 156, 78.1 <溶媒>蒸留水 <陽性対照>2-(2-Furyl)-3-(5-nitro-2-furyl)acrylamide(AF2) 和光純薬工業(株)、N-Ethyl-N'-nitro-N-nitrosoguanidine(ENNG) ナカライテスク(株)、Acridine haltmustard(ICR-191) POLYSCIENCES、2-Aminoanthracene (2AA) 和光純薬工業(株)、溶媒:DMSO</p>
結果	
細胞毒性	
代謝活性ありの場合	生育阻害発現濃度 TA98:625、TA100、TA1535、TA1537:313、WP2uvrA:5000
代謝活性なしの場合	生育阻害発現濃度 TA98、TA100、TA1537:39.1、TA1535:19.5、WP2uvrA:5000
変異原性	
代謝活性ありの場合	試験した全ての用量で変異原性は認められなかった。
代謝活性なしの場合	試験した全ての用量で変異原性は認められなかった。
注釈	特記事項なし
結論	
遺伝子突然変異	陰性
注釈	ライオン株式会社 安全性評価センター
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	社内データ
引用文献(元文献)	文献6
備考	

B. 染色体異常

CHROMOSOMAL ABERRATION

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	97.2%(w/w)、Lot番号:003218
注釈	α-スルホミリスチン酸二ナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)
方法	
方法/ガイドライン	OECD473
GLP適合	はい
試験を行った年	2003
細胞株	Chinese hamster lung (CHL/IU)
代謝活性化(S9)の有無	有
試験条件	<p><用量>短時間処理法(S9-あるいは+、6時間処理-18時間回復):31.3、62.5、125、187.5、250µg/mL 連続処理法(S9-、24あるいは48時間連続処理):31.3、62.5、125、187.5、250µg/mL <溶媒>生理食塩液 <陽性対照>Mitomycin C協和醗酵工業(株)、Benzo(a)pyrene 和光純薬工業(株)、 処理濃度 短時間処理-S9:MMC 0.1µg/mL、短時間処理+S9: BP 20µg/mL 連続処理 :MMC 0.04µg/mL <記録>用量あたり200個(各プレート当たり100個)の分裂中期像について染色体を観察し、構造異常を持つ細胞の出現頻度および種類を記録し、数値異常を持つ細胞が認められた場合は、その数を記録した。 <陽性判定>染色体の構造異常細胞の出現頻度または倍数体の出現頻度が10%以上、かつ、用量相関性も認められた場合を陽性とした。また、単一の用量で10%以上の場合でも、その再現性が認められた場合は総合的に陽性と判断した。</p>
結果	
細胞毒性	
代謝活性ありの場合	125~250µg/mL
代謝活性なしの場合	125~250µg/mL
染色体異常	
代謝活性ありの場合	試験した全ての用量で染色体異常は認められなかった。
代謝活性なしの場合	試験した全ての用量で染色体異常は認められなかった。

注釈	特記事項なし
結論	
染色体異常	陰性
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	社内データ
引用文献(元文献)	文献6
備考	

5-7 *in vivo* 遺伝毒性
GENETIC TOXICITY IN VIVO

5-8 発がん性
CARCINOGENICITY

5-9 生殖・発生毒性(受胎能と発生毒性を含む)
REPRODUCTIVE TOXICITY(Including Fertility and Development Toxicity)

A. 受胎能
FERTILITY

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	97.2%(w/w)、Lot番号:003218
注釈	α -スルホミリスチン酸ナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)
方法	
方法/ガイドライン	OECD422
試験のタイプ	その他
GLP適合	はい
試験を行った年	2003
試験系(種/系統)	Rat Crj: CD(SD)
性別(雄:M、雌:F)	MF
投与量	M: 740、360、175、0 F: 1039、497、249、0 飼料中の被験物質濃度: 1.2、0.6、0.3、0%
各用量群(性別)の動物数	12
溶媒(担体)	選択してください NMF粉末飼料
投与経路	混餌投与
試験期間	雄56日、雌41-45日
交配前暴露期間	14
試験条件	動物の週齢: 10(投与開始時) 投与日数: 雄56日、雌41-45日
統計学的処理	Dunnet
結果	
体重、体重増加量	統計学的有意差なし
摂餌量、飲水量	【親動物】 摂餌量: 雄: 360mg/kg(0.6%)の摂餌量が投与 11~15日に有意に増加($p<0.05$) 雌: 1039mg/kg(1.2%)の摂餌量が、投与4~8日($p<0.05$)、投与8~11日($p<0.01$)、投与11~15日($p<0.05$)に有意に増加 摂水量: 雄の740mg/kg(1.2%)の摂水量が有意に増加($p<0.01$) 試験責任者は、これらの変化に毒性学的意味はないとしている
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	臨床所見なし
妊娠率(妊娠個体数/交配数)	統計学的有意差なし
交尾前期間(交配までの日数及び交配までの性周期回数)	統計学的有意差なし
妊娠期間(妊娠0日から起算)	統計学的有意差なし
妊娠指数(生存胎仔数/着床痕数)	統計学的有意差なし
哺乳所見	
性周期変動	統計学的有意差なし
精子所見	検査せず

血液学的所見(発生率、重篤度)	<p>【親動物】 雌の1039mg/kg(1.2%)において、有意なプロトロンビン時間の延長およびフィブリノーゲンの低値をみとめた</p> <table><tr><td>投与量(mg/kg)</td><td>0</td><td>249</td><td>497</td><td>1039</td></tr><tr><td>プロトロンビン時間(秒)</td><td>12.6±0.3</td><td>13.0±0.3</td><td>13.1±0.5</td><td>13.5±0.4**</td></tr><tr><td>フィブリノーゲン</td><td>351 ±61</td><td>316±25</td><td>301±47</td><td>277±23*</td></tr></table> <p>*:p<0.05、**:p<0.01、NOAEL推定根拠</p>	投与量(mg/kg)	0	249	497	1039	プロトロンビン時間(秒)	12.6±0.3	13.0±0.3	13.1±0.5	13.5±0.4**	フィブリノーゲン	351 ±61	316±25	301±47	277±23*																																																																																	
投与量(mg/kg)	0	249	497	1039																																																																																													
プロトロンビン時間(秒)	12.6±0.3	13.0±0.3	13.1±0.5	13.5±0.4**																																																																																													
フィブリノーゲン	351 ±61	316±25	301±47	277±23*																																																																																													
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	<p>【親動物】 雌雄の0.6%以上の処置群において、トリグリセライド(TG)の有意な低下をみとめた(NOEL設定根拠)</p> <table><tr><td colspan="2"></td><td colspan="4">投与量(mg/kg)</td></tr><tr><td>雄</td><td>0</td><td>175</td><td>360</td><td>740</td><td></td></tr><tr><td>TG</td><td>39±17</td><td>24±9</td><td>16±4**</td><td>18±6**</td><td></td></tr></table> <table><tr><td colspan="2"></td><td colspan="4">投与量(mg/kg)</td></tr><tr><td>雌</td><td>0</td><td>249</td><td>497</td><td>1039</td><td></td></tr><tr><td>TG</td><td>49±24</td><td>24±22</td><td>17±6*</td><td>20±10*</td><td></td></tr></table> <p>*:p<0.05、**:p<0.01、NOEL推定根拠</p> <p>なお、クレアチニンの低下が0.3 %投与群の雄(p<0.05)に、総たん白質の低下が0.6 %投与群の雄(p<0.05)に認められたが、用量との関連はなく、変動範囲内の変化と試験責任者は考察している。</p>			投与量(mg/kg)				雄	0	175	360	740		TG	39±17	24±9	16±4**	18±6**				投与量(mg/kg)				雌	0	249	497	1039		TG	49±24	24±22	17±6*	20±10*																																																													
		投与量(mg/kg)																																																																																															
雄	0	175	360	740																																																																																													
TG	39±17	24±9	16±4**	18±6**																																																																																													
		投与量(mg/kg)																																																																																															
雌	0	249	497	1039																																																																																													
TG	49±24	24±22	17±6*	20±10*																																																																																													
尿検査所見(発生率、重篤度)	所見なし																																																																																																
死亡数(率)、死亡時間	いずれの群においても死亡は認められなかった。																																																																																																
剖検所見(発生率、重篤度)	肉眼所見において、被験物質投与に起因すると考えられる毒性学的変化は認められなかった。																																																																																																
着床数	統計学的有意差なし																																																																																																
黄体数	統計学的有意差なし																																																																																																
未熟卵胞数	検査せず																																																																																																
臓器重量	<p>雄 740mg/kg投与群(1.2%):精巣の絶対重量および相対重量の増加 雌 1039mg/kg投与群(1.2%):肝臓の絶対/相対重量の増加(NOAE設定根拠)、副腎の絶対/相対重量の低下 胸腺、心臓、脾臓の絶対重量の低下、腎臓の相対重量の増加</p> <table><tr><td colspan="2">雄</td><td colspan="4"></td></tr><tr><td><絶対重量></td><td>0</td><td>175</td><td>360</td><td>740</td><td></td></tr><tr><td>精巣</td><td>3.23±0.27</td><td>3.31±0.20</td><td>3.32±0.33</td><td>3.50±0.25*</td><td></td></tr><tr><td><相対重量>(g/100gBW)</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>精巣</td><td>0.68±0.06</td><td>0.69±0.05</td><td>0.69±0.05</td><td>0.76±0.05*</td><td></td></tr></table> <table><tr><td colspan="2">雌</td><td colspan="4"></td></tr><tr><td><絶対重量></td><td>0</td><td>249</td><td>497</td><td>1039</td><td></td></tr><tr><td>肝臓</td><td>10.34±0.86</td><td>10.28±0.96</td><td>10.43±0.69</td><td>11.83±1.48**</td><td>(NOAEL推定根拠)</td></tr><tr><td>副腎</td><td>88±9</td><td>84±6</td><td>79±8*</td><td>71±7**</td><td></td></tr><tr><td>胸腺</td><td>239±33</td><td>246±83</td><td>214±67</td><td>178±47*</td><td></td></tr><tr><td>心臓</td><td>0.97±0.08</td><td>0.99±0.09</td><td>0.91±0.05</td><td>0.87±0.05*</td><td></td></tr><tr><td>脾臓</td><td>0.70±0.1</td><td>0.78±0.14</td><td>0.67±0.07</td><td>0.59±0.08*</td><td></td></tr></table> <table><tr><td><相対重量></td><td>0</td><td>249</td><td>497</td><td>1039</td><td></td></tr><tr><td>肝臓(g/100gBW)</td><td>3.46±0.31</td><td>3.47±0.15</td><td>3.64±0.23</td><td>4.20±0.36**</td><td>(NOAEL推定根拠)</td></tr><tr><td>副腎(mg/100gBW)</td><td>29±3</td><td>28±2</td><td>28±3</td><td>25±3**</td><td></td></tr><tr><td>腎臓(g/100gBW)</td><td>0.71±0.06</td><td>0.75±0.05</td><td>0.74±0.04</td><td>0.79±0.05**</td><td></td></tr></table>	雄						<絶対重量>	0	175	360	740		精巣	3.23±0.27	3.31±0.20	3.32±0.33	3.50±0.25*		<相対重量>(g/100gBW)						精巣	0.68±0.06	0.69±0.05	0.69±0.05	0.76±0.05*		雌						<絶対重量>	0	249	497	1039		肝臓	10.34±0.86	10.28±0.96	10.43±0.69	11.83±1.48**	(NOAEL推定根拠)	副腎	88±9	84±6	79±8*	71±7**		胸腺	239±33	246±83	214±67	178±47*		心臓	0.97±0.08	0.99±0.09	0.91±0.05	0.87±0.05*		脾臓	0.70±0.1	0.78±0.14	0.67±0.07	0.59±0.08*		<相対重量>	0	249	497	1039		肝臓(g/100gBW)	3.46±0.31	3.47±0.15	3.64±0.23	4.20±0.36**	(NOAEL推定根拠)	副腎(mg/100gBW)	29±3	28±2	28±3	25±3**		腎臓(g/100gBW)	0.71±0.06	0.75±0.05	0.74±0.04	0.79±0.05**	
雄																																																																																																	
<絶対重量>	0	175	360	740																																																																																													
精巣	3.23±0.27	3.31±0.20	3.32±0.33	3.50±0.25*																																																																																													
<相対重量>(g/100gBW)																																																																																																	
精巣	0.68±0.06	0.69±0.05	0.69±0.05	0.76±0.05*																																																																																													
雌																																																																																																	
<絶対重量>	0	249	497	1039																																																																																													
肝臓	10.34±0.86	10.28±0.96	10.43±0.69	11.83±1.48**	(NOAEL推定根拠)																																																																																												
副腎	88±9	84±6	79±8*	71±7**																																																																																													
胸腺	239±33	246±83	214±67	178±47*																																																																																													
心臓	0.97±0.08	0.99±0.09	0.91±0.05	0.87±0.05*																																																																																													
脾臓	0.70±0.1	0.78±0.14	0.67±0.07	0.59±0.08*																																																																																													
<相対重量>	0	249	497	1039																																																																																													
肝臓(g/100gBW)	3.46±0.31	3.47±0.15	3.64±0.23	4.20±0.36**	(NOAEL推定根拠)																																																																																												
副腎(mg/100gBW)	29±3	28±2	28±3	25±3**																																																																																													
腎臓(g/100gBW)	0.71±0.06	0.75±0.05	0.74±0.04	0.79±0.05**																																																																																													
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	<p>雌 【肝臓】 0 249 497 1039 小葉中心性肝細胞肥大 ± 0/5 0/5 0/5 5/5 核の大小不同 ± 0/5 0/5 0/5 1/5 限局性壊死 ± 0/5 0/5 0/5 1/5 【胸腺】萎縮 ± 0/5 0/5 0/5 1/5 + 0/5 0/5 0/5 1/5</p>																																																																																																
実際に摂取された量	雄:740, 360, 175mg/kg/日 雌: 1039, 497, 249mg/kg/日																																																																																																
用量反応性																																																																																																	
同腹仔数及び体重	統計学的有意差なし																																																																																																
性比	統計学的有意差なし																																																																																																

生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)	統計学的有意差なし
離乳までの分娩後生存率	検査せず
新生仔所見(肉眼的な異常)	F1の肉眼的異常所見なし
生後発育及び発育率	検査せず
膈開口又は精巣下降(包皮分離)	検査せず
生殖器-肛門間距離などその他の観察事項	検査せず
臓器重量	検査せず
統計的結果	
注釈	
結論	
Pに対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	雄: > 740 雌: > 1039(受胎能)
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	雄: > 740 雌: > 1039
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	検査せず
注釈	ボゾリサーチセンター
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	社内データ
引用文献(元文献)	文献6
備考	

B. 発生毒性

DEVELOPMENTAL TOXICITY

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	97.2%(w/w)、Lot番号:003218
注釈	α -スルホミリスチン酸二ナトリウム0.9%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.8%(w/w)、ミリスチン酸メチル0.1%(w/w)、メタノール0.1%(w/w)、水分0.3%(w/w)
方法	
方法/ガイドライン	OECD422
GLP適合	はい
試験を行った年	2003
試験系(種/系統)	Rat Crj: CD(SD)
性別(雄:M、雌:F)	MF
投与量	雄: 740、360、175、0 雌: 1039、497、249、0 飼料中の被験物質濃度: 1.2、0.6、0.3、0%
各用量群(性別)の動物数	12
投与経路	混餌投与
試験期間	雄56日、雌41-45日
交配前暴露期間	P: 14日間
試験条件	動物の週齢: 10(投与開始時)
統計学的処理	Dunnet
結果	
死亡数(率)、死亡時間	死亡なし
用量あたり妊娠数	統計学的有意差なし
流産数	統計学的有意差なし
早期/後期吸収数	検索せず
着床数	統計学的有意差なし
黄体数	統計学的有意差なし
妊娠期間(妊娠0日から起算)	統計学的有意差なし
体重、体重増加量	統計学的有意差なし
摂餌量、飲水量	摂餌量: 雄: 360mg/kg(0.6%)の摂餌量が投与 11~15日に有意に増加($p<0.05$) 雌: 1039mg/kg(1.2%)の摂餌量が、投与4~8日($p<0.05$)、投与8~11日($p<0.01$)、投与11~15日($p<0.05$)に有意に増加 摂水量: 雄の740mg/kg(1.2%)の摂水量が有意に増加($p<0.01$) 試験責任者は、これらの変化に毒性学的意味はないとしている
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	臨床所見なし

	雌の1039mg/kg(1.2%)において、有意なプロトロンビン時間の延長およびフィブリノーゲンの低値をみとめた																																								
血液学的所見(発生率、重篤度)	<table><tr><td>投与量(mg/kg)</td><td>0</td><td>249</td><td>497</td><td>1039</td></tr><tr><td>プロトロンビン時間(秒)</td><td>12.6±0.3</td><td>13.0±0.3</td><td>13.1±0.5</td><td>13.5±0.4**</td></tr><tr><td>フィブリノーゲン</td><td>351 ±61</td><td>316±25</td><td>301±47</td><td>277±23*</td></tr></table> *:p<0.05、**:p<0.01、NOAEL推定根拠	投与量(mg/kg)	0	249	497	1039	プロトロンビン時間(秒)	12.6±0.3	13.0±0.3	13.1±0.5	13.5±0.4**	フィブリノーゲン	351 ±61	316±25	301±47	277±23*																									
投与量(mg/kg)	0	249	497	1039																																					
プロトロンビン時間(秒)	12.6±0.3	13.0±0.3	13.1±0.5	13.5±0.4**																																					
フィブリノーゲン	351 ±61	316±25	301±47	277±23*																																					
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	雌雄の0.6%以上の処置群において、トリグリセライド(TG)の有意な低下をみとめた(NOEL設定根拠) <table><tr><td colspan="5">投与量(mg/kg)</td></tr><tr><td>雄</td><td>0</td><td>175</td><td>360</td><td>740</td></tr><tr><td>TG</td><td>39±17</td><td>24±9</td><td>16±4**</td><td>18±6**</td></tr></table> <table><tr><td colspan="5">投与量(mg/kg)</td></tr><tr><td>雌</td><td>0</td><td>249</td><td>497</td><td>1039</td></tr><tr><td>TG</td><td>49±24</td><td>24±22</td><td>17±6*</td><td>20±10*</td></tr></table> *:p<0.05、**:p<0.01、NOEL推定根拠 なお、クレアチニンの低下が0.3 %投与群の雄(p<0.05)に、総たん白質の低下が0.6 %投与群の雄(p<0.05)に認められたが、用量との関連はなく、変動範囲内の変化と試験責任者は考察している。	投与量(mg/kg)					雄	0	175	360	740	TG	39±17	24±9	16±4**	18±6**	投与量(mg/kg)					雌	0	249	497	1039	TG	49±24	24±22	17±6*	20±10*										
投与量(mg/kg)																																									
雄	0	175	360	740																																					
TG	39±17	24±9	16±4**	18±6**																																					
投与量(mg/kg)																																									
雌	0	249	497	1039																																					
TG	49±24	24±22	17±6*	20±10*																																					
剖検所見(発生率、重篤度)	肉眼所見において、被験物質投与に起因すると考えられる毒性学的変化は認められなかった。																																								
臓器重量(総子宮量への影響)	測定せず																																								
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	雌 1039mg/kg(1.2%) 肝臓：軽微な小葉中心性肝細胞肥大(5/5)、軽微な核の大小不同(1/5例)、軽微な肝細胞の限局性壊死(1/5) 胸腺：軽微(1/5)又は軽度(1/5)な萎縮投与群 <table><tr><td></td><td colspan="4">投与量(mg/kg)</td></tr><tr><td>【肝臓】</td><td>0</td><td>249</td><td>497</td><td>1039</td></tr><tr><td>小葉中心性肝細胞肥大</td><td>± 0/5</td><td>0/5</td><td>0/5</td><td>5/5</td></tr><tr><td>核の大小不同</td><td>± 0/5</td><td>0/5</td><td>0/5</td><td>1/5</td></tr><tr><td>限局性壊死</td><td>± 0/5</td><td>0/5</td><td>0/5</td><td>1/5</td></tr><tr><td>【胸腺】</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>萎縮</td><td>± 0/5</td><td>0/5</td><td>0/5</td><td>1/5</td></tr><tr><td></td><td>+ 0/5</td><td>0/5</td><td>0/5</td><td>1/5</td></tr></table> 軽度な副腎の皮質細胞肥大が対照群3/5例及び雌1039mg/kg群の2/5例、軽微又は軽度な脾臓の髄外造血が対照群及び1.2 %投与群で各5例、中等度な大腿骨及び胸骨における造血細胞の増数が対照群及び1.2 %投与群で各5例にみられたが、妊娠・分娩に伴う特殊条件下に伴う変化であると考えられ、被験物質投与との関連はないと試験責任者は判断している。		投与量(mg/kg)				【肝臓】	0	249	497	1039	小葉中心性肝細胞肥大	± 0/5	0/5	0/5	5/5	核の大小不同	± 0/5	0/5	0/5	1/5	限局性壊死	± 0/5	0/5	0/5	1/5	【胸腺】					萎縮	± 0/5	0/5	0/5	1/5		+ 0/5	0/5	0/5	1/5
	投与量(mg/kg)																																								
【肝臓】	0	249	497	1039																																					
小葉中心性肝細胞肥大	± 0/5	0/5	0/5	5/5																																					
核の大小不同	± 0/5	0/5	0/5	1/5																																					
限局性壊死	± 0/5	0/5	0/5	1/5																																					
【胸腺】																																									
萎縮	± 0/5	0/5	0/5	1/5																																					
	+ 0/5	0/5	0/5	1/5																																					
同腹仔数及び体重	統計学的有意差なし																																								
生存数(生存胎仔数及び胎仔数)	統計学的有意差なし																																								
性比	統計学的有意差なし																																								
生存率(生後4日目生存仔数/総分)	統計学的有意差なし																																								
生後発育	検査せず																																								
分娩後生存率	統計学的有意差なし																																								
肉眼的異常(外表観察、内臓標本、	外表観察において、肉眼的異常なし																																								
実際に投与された量	雄: 740, 360, 175mg/kg/日 雌: 1039, 497, 249mg/kg/日																																								
用量反応性	あり																																								
統計的結果	統計学的有意差なし																																								
注釈																																									
結論																																									
P1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	M: > 740 F: 497																																								
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	M: > 740 F: > 1039																																								
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	検査せず																																								
注釈	ボゾリサーチセンター																																								
信頼性	1 制限なく信頼性あり																																								
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。																																								
出典	社内データ																																								
引用文献(元文献)	文献6																																								
備考																																									

5-10その他関連情報

OTHER RELEVANT INFORMATION

5-11 ヒト暴露の経験

EXPEIENCE WITH HUMAN EXPOSURE

試験物質名	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-22-2
純度等	
注釈	
製造／加工／使用情報	衣料用洗剤として使用
研究デザイン	
仮説検証	
データ収集方法	
被験者の説明	一般消費者等
暴露期間	常時
測定又は評価曝露データ	
結果	
統計的結果	
発病頻度	
相関	
分布	
研究提供者等	
注釈	
結論	
結論	
注釈	
信頼性	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献(元文献)	
備考	

6 参考文献(以下に欄を追加の上、一文献について一行にて一覧を記載)

文献番号(半角数字: 自動的に半角になります)	詳 細(OECD方式での記入をお願いします。下の記入例参照。)	日本語の場合、以下の欄をお願いします。
1	Takei T, Odake H, Miura K, and Takagi Y (2006) Ecotoxicity of Tetradecanoic Acid, 2-sulfo-, 1-methylester, Sodium Salt (C14MES), J Oleo Sci, 55(3), 121-126	
2	UNEP PUBLICATIONS (2003) SIDS Initial Assessment Report For SIAM 16, 27-30	
3	Miura K (2007) Aquatic Risk Assessment of 2-Sulfonato Fatty Acid Methyl Ester Sodium Salt(MES), J Oleo Sci, 56(3), 123-128	
4	Maurer EW, Weil JK, and Linfield WM (1977) The Biodegradation of Esters of α -Sulfo Fatty Acids, J Am Oil Chem Soc, 54, 582-584	
5	Masuda M, Odake H, Miura K, and Oba K (1994) Effects of 2-Sulfonatofatty Acid Methyl Ester (α -SFMe) on Aquatic Organisms and Activated Sludge, Yukagaku, 43, 551-555	
6	Sato J, Yamamoto Y, Nakamura T, Ishida S, and Takagi Y (2005) Toxicity Studies of Tetradecanoic Acid, 2-Sulfo-, 1-Methylester, Sodium Salt (C14-MES), J Toxicol Sci, 30(4), 339-347	
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19		
20		
21		
22		
23		

項目名 (同一の試験項目について複数の試験がある場合、当該項目行をコピー追加してください。)	データ入力欄
	黄色＝必須項目
	青＝任意項目
	紫＝一部の物質で必須項目

1. 一般情報

GENERAL INFOMATION

1.01 物質情報

SUBSTANCE INFOMATION

CAS番号	4016-24-4
物質名(日本語名)	ヘキサデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩
物質名(英名)	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
別名等	パルミチン酸, 2-スルホ-, 1-メチルエステル, ナトリウム塩
別名等	Sodium 1-methoxy-1-oxohexadecane-2-sulphonate
別名等	1-Methoxycarbonyl-pentadecane-1-sulfonic acid, sodiun-salt
別名等	Sodium 1-methoxy-1-oxohexadecane-2-sulfonate
国内適用法令の番号	2-3065
国内適用法令物質名	スルホ天然油脂脂肪酸メチルのナトリウム塩
OECD/HPV名称	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
分子式	C17H33NaO5S
構造式	$\text{C}_{14}\text{H}_{29}-\underset{\text{SO}_3\text{Na}}{\text{CH}}-\text{COOCH}_3$
備考	OECD SIDS(SIAM16)

1.02 安全性情報収集計画書/報告書作成者に関する情報

SPONSOR INFOMATION

機関名	ライオン株式会社
報告書作成日	2009年3月6日
備考	

1.1 一般的な物質情報

GENERAL SUBSTANCE INFOMATION

物質のタイプ	有機化合物
物質の色・におい・形状等の情報	淡黄色固体
物理的状態(20°C、1013hPa)	固体
純度(重量/重量%)	70～80%
出典	社内データ
備考	日本国内では、Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt(CAS:4016-22-2)との混合物として流通 (Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt is 70 - 80 % w/w, Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt is 30 - 20 % w/w)

1.2 不純物

IMPURITIES

CAS番号	4016-22-2
物質名称(IUPAC)	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt
国内適用法令の番号	2-3065
適用法令における名称	スルホ天然油脂脂肪酸メチルのナトリウム塩
含有率(%)	20 - 30 % w/w
出典	社内データ
備考	

1.3 添加物

ADDITIVES

CAS番号	
物質名称(IUPAC)	
国内適用法令の番号	
適用法令における名称	
含有率(%)	なし
出典	社内データ
備考	

1.4 別名

SYNONYMS

物質名-1	Sodium 1-methoxy-1-oxohexadecane-2-sulphonate
物質名-2	1-Methoxycarbonyl-pentadecane-1-sulfonic acid, sodiun-salt
物質名-3	Sodium 1-methoxy-1-oxohexadecane-2-sulfonate
出典	
備考	OECD SIDS(SIAM16)

1.5 製造・輸入量

QUANTITY

製造・輸入量	10,000 - 100,000トン/年
報告年	2001
出典	OECD SIDS(SIAM16)
備考	

1.6 用途情報

USE PATTERN

主な用途情報	その他:下欄のセルに記載
	衣料用洗剤の界面活性剤
工業的用途	化学工業:基本化学
用途分類	9クリーニング/洗剤と添加物-173洗浄剤
出典	OECD SIDS(SIAM16)
備考	

1.7 環境および人への暴露情報

SOURCES OF EXPOSURE

暴露に関する情報	<p>水中では、本物質はNaイオンを遊離してイオン型で存在する。pKa値は、-1.03と計算されている(CompuDrug Pallas v3.0)。</p> <p>本物質は光化学的に誘導されるOHラジカルによって分解され、半減期は6.68時間である(AopWin v1.9)。水中での安定性試験において、本物質はpH4.7.9、50°C、5日の条件下で、加水分解されないことが示されている(CERI 2000)。本物質は、OECD TG301C法によるBODを指標とした生分解性試験の結果、28日間で91 - 94 %が分解される(CERI 2000a)。本物質のイオン化能から、生物蓄積性は生じないと考えられる。本物質の界面活性能から、環境中での挙動は、フガシテモデルでは正確に予測できない。本物質は主に水環境中に放出されるが、その他の環境区分には、分配しないと考えられる。衣料用洗剤中に含まれる本物質の最大濃度は10.0%(通常5-10%)である。衣料用洗剤の通常(あるいは推奨される)使用濃度は、15g/30L水である。通常使用条件下における本物質の洗濯水中の濃度は、50 mg/L である。4人家族の平均排水量を1日1000Lとした際に、公共水系に放出される本物質の濃度は、1家族当たり1.5 mg/L/family/day である。生分解性による除去率は98% である(3日後のHPLCによる残存量は0%であり、14日後のDOCによる除去率は98%であった)。排水中の残存濃度を0.03mg/L、河川中に放出されたときの希釈率を100として、予測される局所的な環境中濃度は、0.0003 mg/Lと計算される。</p> <p>局所的な予測環境中濃度(PEC)</p> $= \frac{\text{製品中含有量}(\%) / 100 \times \text{洗濯機中の製品量}(\text{mg}) \times (100 - \text{除去率}(\%)) / 100}{1 \text{ 日当りの家族毎の公共下水の排水量}(\text{L}) \times \text{希釈率}}$ $= \frac{10(\%) / 100 \times 15000(\text{mg}) \times (100 - 98(\%)) / 100}{1000(\text{L}) \times 100}$ $= 0.0003 \text{ mg/L}$ <p>(出典) OECD SIAM16より抜粋・要約</p>
暴露に関する情報	<p>本物質は、パーム油とヤシ油由来の1-methyl hexadecanoic acid(C16 acid)と1-methyl tetradecanoic acid(C14 acid)の混合物を、三酸化硫黄を用いてスルホン化することによって合成される。C14およびC16酸のスルホン化後の混合物[C14/C16の割合は、20/80から30/70となる]を過酸化水素で漂白し、水酸化ナトリウムで中和したものを、スラリー溶液としてタンクに貯蔵し、同一プラント内で洗浄剤成分として用いられる。洗浄剤は、幾つかの添加物をスラリーに加えて調製し、その後スプレードライにより乾燥し、市販製品として梱包される。合成と調製は、閉鎖環境でリモートコントロールによる持続的な工程であり、完全に自動化されたパッケージマシンにより梱包され、市販製品の梱包時には局所排気装置が用いられる。</p> <p>通常、作業者の業務は目視検査であり、本物質への直接的な接触は、スルホン化された混合物や最終製剤の品質管理におけるサンプリングを除いて、必要とされない。本物質は、蒸気圧を持たないことから、これらのサンプリング操作においては、スラリーの経皮接触や粉塵の吸入が想起される暴露となる。サンプリングやスラリー水溶液の分析に対するEHEDerは、本作業が両手に二次的な接触を生じる連続的な直接作業で、13分間行くと仮定した場合、EASEモデルに従って0.26mg/kg/日と推定される。洗浄剤のサンプリングやスラリー水溶液の分析に対するEHEinは、本作業が局所排気装置を用いる直接作業で、35分間行い、この界面活性剤が容易に凝集すると仮定した場合で、0.005mg/kg/日と推定される。EASEモデルに従って評価される暴露濃度は、0.2-0.5mg/m³であり、洗浄剤のサイロにおける総粉塵量の実測濃度は、0.53mg/m³より少ない。</p> <p>作業者は、サンプリング操作中は、手袋、保護眼鏡、粉塵マスクを着用しており、洗浄剤中の本物質の濃度は10%より少ない。正確な暴露は、これらの値よりも低くになると考えられる。本物質に対する職業暴露標準値は、与えられていない。</p> <p>(出典) OECD SIAM16より抜粋・要約</p>
出典	OECD SIDS(SIAM16)
備考	

1.8 追加情報

ADDITIONAL INFORMATION

既存分類	
職業暴露限界	
廃棄方法	関連法規に従って適切に実施する。
文献調査の範囲と日付	Toxline、Medline、HSDB、Chemfinder、Beilstein、CAplus（以下レビュー）IUCLID、NITE CHRIP、文献調査の日付：2008年9月1日～2008年9月12日
出典	社内データ
備考	

2. 物理化学的性状

PHYSICAL CHEMICAL DATA

2.0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	別添資料を参照
-------------	---------

2.1 融点

MELTING POINT

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	96.6w/v%, Lot:000203
注釈	α -スルホホミリスチン酸二ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 102 "融点/融点範囲(溶融顕微鏡法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2000
試験条件	OECD Test Guideline 102 "融点/融点範囲(溶融顕微鏡法)"に準じた
結果	
融点: °C	178.2-181.9°C
分解: °C	いいえ
昇華: °C	いいえ
結論	178.2-181.9°C
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1、文献2
備考	

2.2 沸点

BOILING POINT

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	96.6w/v%, Lot:000203
注釈	α -スルホホミリスチン酸二ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 103 "沸点(Siwoloboff法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2000
試験条件	OECD Test Guideline 103 "沸点(Siwoloboff法)"に準じた
結果	
沸点: °C	
圧力	
分解: °C	はい
	260°C付近で褐色に変色していた
結論	260°C付近で褐色に変色していた
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1、文献2
備考	

2.3 密度(比重)

DENSITY(RELATIVE DENSITY)

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	96.6w/v%, Lot:000203
注釈	α -スルホミリスチン酸ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	比重びん法-2(JIS K7112-1980 プラスチックの密度と比重の測定方法)
GLP	いいえ
試験を行った年	2000
試験条件	比重びん法-2(JIS K7112-1980 プラスチックの密度と比重の測定方法)に準じた
結果	1.211g/cm ³
タイプ	密度
温度(°C)	25±1°C
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり キースタディ
信頼性の判断根拠	JIS法に従って実施した非GLP試験
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1、文献2
備考	

2.4 蒸気圧

VAPOUR PRESSURE

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	96.6w/v%, Lot:000203
注釈	α -スルホミリスチン酸ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 104 "蒸気圧(気体流動法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2000
試験条件	装置 蒸気圧測定装置(久留米事業所組み立て) 試験温度 100°C 試験連数 n=1 流量 20mL/min 捕集溶媒 精製水 キャリアーガス 高純度窒素ガス(99.99%)
結果	
蒸気圧	≤0.017Pa
温度: °C	100°C
分解: °C	いいえ
結論	≤0.017Pa
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1、文献2
備考	

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	
注釈	
方法	MPBPWIN(v1.40)
GLP	
試験を行った年	2003
試験条件	
結果	
蒸気圧	5.12E-13 Pa
温度: °C	25
分解: °C	その他: 下欄のセルに記載
結論	5.12E-13 Pa
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり 選択してください
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1
備考	

2.5 分配係数(log Kow)

PARTITION COEFFICIENT

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	
注釈	
方法	KOWWIN v1.66
GLP	いいえ
試験を行った年	2003
試験条件	
結果	
Log Kow	4.06
温度: °C	
結論	4.06
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1
備考	

2.6.1 水溶解性(解離定数を含む)

WATER SOLUBILITY & DISSOCIATION CONSTANT

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	96.6w/v%, Lot:000203
注釈	α -スルホミリスチン酸ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 105 "水への溶解性(フラスコ法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2000
試験条件	試験温度及び振とう時間 30±1°Cで24、48及び72時間振とうした後、25±1°Cで24時間振とうした。 試験容器 共栓付ガラス製フラスコ 試験連数 n=2
結果	
水溶解度	16 g/L (24時間後) 17 g/L (48時間後) 17 g/L (72時間後)
温度: °C	25
pH	6.25(24時間後) 6.25(48時間後) 6.20(72時間後)
pH測定時の物質濃度	16 g/L (6.25 24時間後) 17 g/L (6.25 48時間後) 17 g/L (6.20 72時間後)
結論	17 g/L
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	選択してください
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1、文献2
備考	
解離定数	
試験物質	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	4016-24-4、96.6w/v%、Lot:000203
方法	OECD Test Guideline 112 "水中における解離定数(電気伝導度法)"
温度: °C	25
GLP	いいえ
試験条件	被験物質濃度 0.100、0.200、1.00、2.00及び5.00mmol/L 測定機器 電気伝導度計(東亜電波工業製 型CM-60S) セル定数 0.963cm ⁻¹ 試験温度 25±1°C 試験連数 n=3
試験を行った年	2000
結果	測定不可
結論	測定不可

注釈	本試験条件において解離定数は濃度に依存し、また、濃度の平方根とモル伝導度の間には直線関係があることから、被験物質は解離性物質（強電解質）であると判断された。よって、解離定数は測定不可とした。
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	選択してください
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1、文献2
備考	
試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	
注釈	
方法	Other
GLP	不明
試験を行った年	1993
試験条件	臨界ミセル濃度(CMC)として
結果	
水溶解度	271.9mg/L
温度: °C	25
pH	不明
pH測定時の物質濃度	
結論	271.9mg/L
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	ピアレビューされた公表論文からのデータ
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1、文献3
備考	本物質が水中でミセルを形成することから、臨界ミセル濃度(CMC)を水溶解性として記載。
解離定数	
試験物質	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	4016-24-4
方法	
温度: °C	
GLP	
試験条件	
試験を行った年	
結果	
結論	
注釈	
信頼性スコア	選択してください
	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献	
備考	

2.6.2 表面張力
SURFACE TENSION

2.7 引火点(液体)
FLASH POINT(LIQUIDS)

2.8 自己燃焼性 (固体／気体)
AUTO FLAMMABILITY(SOLIDS/GASES)

2.9 引火性
FLAMMABILITY

2.10 爆発性
EXPLOSIVE PROPERTIES

2.11 酸化性
OXIDISING PROPERTIES

2.12 酸化還元ポテンシャル
OXIDATION/REDUCTION POTENTIAL

2.13 その他の物理化学的性状に関する情報
ADDITIONAL INFOMATION

3. 環境運命と経路
ENVIRONMENTAL FATE AND PATHWAYS

3.0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	別添資料を参照
-------------	---------

3.1 安定性

STABILITY

3.1.1. 光分解

PHOTODEGRADATION

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	
注釈	
方法	計算値 AOPWIN v.1.90
タイプ	間接光分解
GLP	
試験を行った年	2003
光源と波長(nm)	
太陽光強度に基づいた相対強度	
物質のスペクトル	
試験条件	光照射時間:12時間/日
結果	
物質濃度	
温度(°C)	
直接光分解	
半減期t1/2	
分解度(%)と時間	
量子収率 (%)	
間接光分解	
増感剤(タイプ)	OHラジカル
増感剤濃度	1.5×10^6 OH/cm ³
速度定数	$19.23E-12$ cm ³ /molecule・秒
半減期t1/2	t1/2=0.556日
分解生成物	不明
結論	t1/2=0.556日
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法
出典	OECD SIDS (SIAM16)
引用文献	文献1
備考	

3.1.2. 水中安定性(加水分解性)

STABILITY IN WATER

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	96.6w/v%, Lot:000203
注釈	α-スルホミリスチン酸ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 111 "pHの関数としての加水分解"
GLP	いいえ
試験を行った年	2000
試験条件	被験物質濃度 約1000mg/L 試験温度 50±1°C 試験液のpH pH4、pH7、pH9 試験容器 共栓付ガラス製フラスコ 試験連数 n=2 試験期間 5日間
結果	
設定濃度	約1000mg/L
実測濃度	
所定時間後の分解度(%)、pH、温度	
半減期	予備試験の結果、被験物質はpH4、7及び9において加水分解性なしと判断された。
分解生成物	いいえ
結論	加水分解性なし
注釈	予備試験の結果、被験物質はpH4、7及び9において加水分解性なしと判断された。
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	OECD SIDS (SIAM16)
引用文献	文献1、文献2
備考	

3.1.3. 土壌中安定性
STABILITY IN SOIL

3.2. モニタリングデータ(環境)
MONITORING DATA(ENVIRONMENT)

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt									
CAS番号	4016-24-4									
純度等										
注釈										
方法	LC/MS									
測定タイプ(地点)	その他: 下欄のセルに記載									
	多摩川(羽村堰、原橋、田園調布堰)、江戸川(金町)、荒川(治水橋、笹目橋)、淀川(枚方大橋)									
媒体	水									
結果	測定年	2004年			2005年			2006年		
	測定月	6月	9月	12月	3月	6月	9月	12月	3月	
	羽村堰	ND	0.05	ND	ND	ND	ND	ND	ND	
	多摩川原橋	0.05	0.06	0.1	0.17	0.05	0.02	0.08	0.09	
	田園調布堰	ND	0.02	0.52	0.46	0.02	ND	0.09	0.17	
	金町	ND	ND	0.18	0.27	ND	ND	0.08	0.06	
	治水橋	ND	ND	0.38	0.77	ND	ND	0.34	0.12	
	笹目橋	0.03	0.04	0.68	0.66	0.04	0.03	0.08	0.54	
	枚方大橋	ND	0.03	0.04	ND	ND	ND	0.19	0.03	
	※実測値(μg/L)									
結論	幾何平均値:0.04μg/L(最大値:0.57、95%タイル:0.77)									
注釈	定量下限:0.05μg/L。平均値、95%タイルの算出:定量下限以下の場合は定量下限値の半量で検出されたとして算出									
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり									
	キースタディ									
信頼性の判断根拠	日本石鹼洗剤工業会による環境モニタリングに合わせて採水・測定しており、ピアレビューされた学術誌に掲載されている									
出典	社内データ									
引用文献	文献4									
備考										

3.3. 移動と分配
TRANSPORT AND DISTRIBUTION

3.3.1 環境区分間の移動
TRANSPORT BETWEEN ENVIRONMENTAL COMPARTMENTS

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt			
CAS番号	4016-24-4			
純度等				
注釈				
方法	Fugacity model III			
結果				
媒体	大気－水－土壌－底質			
環境分布予測と媒体中濃度 (levelⅢ/Ⅲ)	分布(%) 大気 1.03	水 33	土壌 63.9	底質 2.43
結論	分布(%) 大気 1.03	水 33	土壌 63.9	底質 2.43
注釈	EPISUIT(version 3.11)			
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり			
	キースタディ			
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法			
出典	社内データ			
引用文献				
備考				

3.3.2 分配
DISTRIBUTION

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	
注釈	
媒体	水-空気
方法	ヘンリー定数

試験条件	
結果	$1.61 \times 10^{-4} \text{ Pa} \times \text{m}^3/\text{mole}$
結論	$1.61 \times 10^{-4} \text{ Pa} \times \text{m}^3/\text{mole}$
注釈	HENRYWIN v3.10、2006年、25°C
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法
出典	社内データ
引用文献	
備考	

3.4 好気性生分解性

AEROBIC BIODEGRADATION

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt																												
CAS番号	4016-24-4																												
純度等	純度: 96.6w/v%、ライオン株式会社、Lot:000203																												
注釈	不純物: α-スルホホリスチン酸ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)、																												
方法	OECD 301C (1992) "Ready Biodegradability: Modified MITI Test (I)"																												
培養期間	28日間																												
植種源	活性汚泥																												
GLP	はい																												
試験を行った年				2000																									
試験条件	試験液量 300mL																												
試験物質濃度	100mg/L																												
汚泥濃度	30mg/L																												
培養温度 °C	25±1°C																												
対照物質および濃度(mg/L)	対照物質: アニリン(昭和化学製、試薬特級、Lot:HK-2732D)、濃度: 100mg/L																												
分解度測定方法	閉鎖系酸素消費量測定装置による生物化学的酸素要求量(BOD)の測定 全有機炭素分析法(TOC)による溶存有機炭素の分析 高速液体クロマトグラフィー(HPLC)による被験物質の分析																												
分解度算出方法	BOD																												
結果																													
最終分解度(%) 日目	(%) (日目)																												
分解速度-1	42, 42, 44 % (7日目)																												
分解速度-2	58, 56, 57 % (14日目)																												
分解速度-3	82, 82, 83 % (21日目)																												
分解速度-4	91, 92, 94 % (28日目)																												
分解生成物	不明																												
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果	TOC、HPLC																												
対象物質の7, 14日目の分解度	7日目: 59%、14日目: 76%																												
その他	28日後における分解度 <table><tr><td></td><td colspan="4">分解度(%)</td></tr><tr><td></td><td>n=1</td><td>n=2</td><td>n=3</td><td>平均</td></tr><tr><td>BODによる結果</td><td>91</td><td>92</td><td>94</td><td>92</td></tr><tr><td>TOCによる結果</td><td>93</td><td>92</td><td>92</td><td>92</td></tr><tr><td>HPLCによる結果</td><td>100</td><td>100</td><td>100</td><td>100</td></tr></table>					分解度(%)					n=1	n=2	n=3	平均	BODによる結果	91	92	94	92	TOCによる結果	93	92	92	92	HPLCによる結果	100	100	100	100
	分解度(%)																												
	n=1	n=2	n=3	平均																									
BODによる結果	91	92	94	92																									
TOCによる結果	93	92	92	92																									
HPLCによる結果	100	100	100	100																									
結論	易分解性																												
注釈																													
信頼性スコア	1 制限なく信頼性あり																												
信頼性の判断根拠	キースタディ 本試験は、OECDテストガイドラインに準拠して、GLPで実施された試験である。また、試験結果に影響を与える要因はなく、試験計画書からの逸脱事項もなかった。																												
出典	OECD SIDS(SIAM16)																												
引用文献	文献1、文献5																												
備考																													

試験物質名	混合物(Sodium 2-sulfonatofatty acid methyl ester)
CAS番号	4016-24-4
純度等	R-CH(SO ₃ Na)COOCH ₃ , R:C ₁₂ H ₂₅ ~C ₁₄ H ₂₉ , 平均分子量: 363 純度: 91.0w/v%
注釈	
方法	OECD 301C (1992) "Ready Biodegradability: Modified MITI Test (I)"
培養期間	28日間
植種源	活性汚泥
GLP	いいえ
試験を行った年	1993
試験条件	試験液量 900mL
試験物質濃度	5, 50, 100mg/L
汚泥濃度	10, 30mg/L
培養温度 °C	25±1°C
対照物質および濃度(mg/L)	

分解度測定方法	閉鎖系酸素消費量測定装置による生物化学的酸素要求量(BOD)の測定			
分解度算出方法				
結果				
最終分解度(%) 日目	(%) (日目)			
分解速度-1	被験物質濃度 活性汚泥濃度 (7日目)	5mg/L 10mg/L 51.7	50mg/L 30mg/L 55.4	100mg/L 30mg/L 51.2%
分解速度-2	被験物質濃度 活性汚泥濃度 (14-15日目)	5mg/L 10mg/L 79.3	50mg/L 30mg/L 62.9	100mg/L 30mg/L 61.6%
分解速度-3	被験物質濃度 活性汚泥濃度 (22日目)	5mg/L 10mg/L 89.7	50mg/L 30mg/L 72.3	100mg/L 30mg/L 67.0%
分解速度-4	被験物質濃度 活性汚泥濃度 (28日目)	5mg/L 10mg/L 93.1	50mg/L 30mg/L 78.2	100mg/L 30mg/L 70.9%
分解生成物	不明			
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果				
対象物質の7, 14日目の分解度	7日目: 51.2%, 15日目: 61.6%			
その他	28日後における分解度 BODによる結果 70.9%			
結論	易分解性			
注釈				
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり			
	選択してください			
信頼性の判断根拠	本試験は、OECDテストガイドラインに準拠して、非GLPで実施された試験である。			
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ			
引用文献	文献1、文献6			
備考				

3.5. BOD-5、CODまたはBOD-5／COD比
BOD-5、COD OR RATIO BOD-5/COD

3.6 生物濃縮性
BIOACCUMULATION

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	
注釈	
方法	BCFWIN v2.14
生物種	
暴露期間 (日)	
曝露濃度	
排泄期間	
GLP	
試験を行った年	2003
分析方法	
試験条件	
被験物質溶液	
対照物質	
対照物質名及び分析方法	その他: 下欄のセルに記載
試験方式／実施	
結果	
死亡率／行動	
脂質含有量 (%)	
試験中の被験物質濃度	
濃縮係数(BCF)	70.79
取込／排泄定数	
排泄時間	
代謝物	
その他の観察	
結論	70.79
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に用いられている計算方法
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1
備考	

項目名 (同一の試験項目について複数の試験がある場合、当該項目行をコピー追加してください。)	データ入力欄
	黄色＝必須項目
	青＝任意項目
	紫＝一部の物質で必須項目

4-0 カテゴリー評価

4-1 魚への急性毒性

ACUTE TOXICITY TO FISH

試験物質	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	CAS No: 4016-24-4、純度: 96.6w/v%、不純物: α -スルホミリスチン酸ニナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、ノルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)、ライオン株式会社、Lot:000203
方法	OECD Test Guideline 203「魚類毒性試験」(1992年)
GLP	はい
試験を行った年	2001
魚種、系統、供給者	魚種: ヒメダカ (<i>Oryzias latipes</i>) 系統: - 供給者: 愛知県弥富地区養魚場
エンドポイント	96h-LC50
試験物質の分析の有無	あり
試験物質の分析方法	LC-MS(検出限界: 0.02mg/L) 各試験容器より試験液2.0~3.0mLをバイアル瓶に採取し等量のメタノールを加える。そのうち1.0~1.5mLをLC-MSで分析。検量線から被験物質濃度を求める。定量下限値: 0.05mg/L
結果の統計解析手法	各濃度区での死亡数と供試個体数(10尾)を算出し、binomial法により半数致死濃度(LC50)および、その95%信頼限界を算出(TOXDAT Multi-Method Program(米EPA)の計算式利用)
試験条件	
試験魚の月齢、体長、体重	月齢: 不明 体長: 2.31cm(2.18~2.46cm) 体重: 0.2105g(0.1684~0.2740g)
試験用水量あたりの魚体重	0.70g/L(0.56~0.91g/L)
参照物質での感受性試験結果	基準物質(硫酸銅(II)五水和物)による急性毒性の結果、96時間LC50は、0.46mg/Lであった
じゅん化条件	試験条件と同条件(方式: 半止水式(24時間換水)、温度: 24 \pm 1 $^{\circ}$ C)で12日間以上じゅん化した。飼料はTetramineを与え、試験開始前24時間は絶食した。試験には健康で肉眼的に正常な個体を使用した。暴露開始前7日間の死亡率は1%であった。
希釈水源	活性炭により脱塩素された水道水
希釈水の化学的性質	硬度: 25.0mg/L (CaCO ₃ 換算)、pH: 7.0 項目 濃度 BOD 0.5 mg/L COD 0.8 mg/L pH 7.0 大腸菌群 N.D. 水銀 <0.003 mg/L 銅 <0.005 mg/L カドミウム <0.02 mg/L 亜鉛 <0.03 mg/L 鉛 <0.2 mg/L クロミウム <0.05 mg/L 鉄 0.05 mg/L 遊離塩素 <0.05 mg/L フッ化物 <0.05 mg/L アンモニアイオン <0.1 mg/L ヒ素 <0.001 mg/L 蒸発残留物 83 mg/L 電気伝導性 9.3mS/m 総硬度 (CaCO ₃ 換算) 25.0 mg/L アルカリ度 (換算不明) 17.0 mg/L 総有機リン化合物 <0.001 mg/L シマジン <0.0003 mg/L thiobencarb系除草剤 <0.002 mg/L thiuram系防カビ剤 <0.0006 mg/L
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	被験物質150mg/L試験原液を希釈水に添加し、設定濃度の試験液を必要量調製した。試験液の状態を観察し、無色透明で沈殿などがないことを確認した。
試験物質の溶液中での安定性	試験開始時の被験物質濃度は0.22~3.83mg/Lであり、試験開始後24時間の被験物質濃度は0.21~3.70mg/Lであった。設定濃度(0.26~5.00mg/L)に対する実測濃度の割合は、69.8~81.3%であった。実測濃度が設定濃度の \pm 20%を外れたので試験結果の算出には実測濃度の幾何平均値を用いた。
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	使用せず

暴露容器	3L容ガラスビーカー 試験液量: 3.0L 蓋の有無: 記載なし 通気: なし				
暴露期間	96時間				
試験方式	半止水				
換水率/換水頻度	換水頻度: 24時間当たり1回				
連数、1連当たりの魚数	連数: 1連/濃度区 連当たりの魚数: 10尾				
影響が観察された少なくとも1濃度区及び対照区における水質	変動なし(pH: 6.8〜7.3、DO: 5.0〜8.3mg/L、水温: 23.1〜23.7℃)				
試験温度範囲	24±1℃				
照明の状態	室内光、16時間明／8時間暗				
平均測定濃度の計算方法	幾何平均				
結果					
設定濃度	0.26, 0.48, 0.86, 1.54, 2.78, 5.00 mg/L				
実測濃度	試験液中の被験物質濃度の経時変化				
	設定濃度 (mg/L)1)	測定濃度 (mg/L)			平均測定濃度
	(mg/L)	0時間(新)	設定値に対する%	24時間(旧)	設定値に対する%
	0	<0.02	—	<0.02	—
	0.26	0.22	—	0.21	—
	0.48	0.39	81.3	0.36	75.0
	0.86	0.62	72.1	0.60	69.8
	1.54	1.17	76.0	1.09	70.8
	2.78	2.05	73.7	1.94	69.8
5.00	3.83	76.6	3.70	74.0	
1): 幾何平均 新: 新規に調製された試験液 旧: 24時間暴露後の試験液					
生物学的影響観察	対照区および全ての濃度区で試験期間中に異常な所見は観察されなかった				
累積死亡率の表	死亡個体数(死亡率)				
	実測濃度(mg/L)	24hr	48hr	72hr	96hr
	対照区	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	0.21	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	0.37	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	0.61	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	1.13	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
	1.99	2(20)	8(80)	10(100)	a
	3.76	10(100)	a	a	a
	a: 全例死亡のため、観察せず				
統計的結果	LC50(96hr)=1.50mg/L(実測) 95%信頼区間: 1.13〜1.99mg/L LC0(96hr)=1.13mg/L(実測) LC100(96hr)=1.99mg/L(実測)				
注釈					
対照区における死亡率	0%				
異常反応	異常反応なし				
その他の観察結果	特記事項なし				
結論					
結果(96h-LC50)	LC50(96hr)=1.50mg/L(実測)				
信頼性スコア	1. 制限なく信頼性あり				
キースタディ	キースタディ				
信頼性の判断根拠	本試験は、OECD TG 203に準拠して、GLPで実施された試験である。また、試験結果に影響を与える要因はなく、試験計画書からの逸脱事項もなかった。				
出典	OECD SIDS(SIAM16)				
引用文献	文献1、文献8				
備考					

4-2 水生無脊椎動物への急性毒性(例えばミジンコ)

ACUTE TOXICITY TO AQUATIC INVERTEBRATES (DAPHNIA)

試験物質	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	CAS No: 4016-24-4、純度: 96.6w/v%、不純物: α-スルホミリスチン酸ニナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)、ライオン株式会社、Lot:000203
方法	OECD Test Guideline 202「ミジンコ類、急性遊泳阻害試験および繁殖試験」(1984年)
GLP	はい
試験を行った年	2001
生物種、系統、供給者	生物種: オオミジンコ (<i>Daphnia magna</i>) 起源: 独立行政法人 国立環境研究所 供給者: 試験機関において繁殖飼育している個体を用いた

エンドポイント	遊泳阻害の48h-EC50				
試験物質の分析の有無	あり				
試験物質の分析方法	LC-MS(検出限界:0.02mg/L) 各試験液容器より試験液0.2から1.0mLをバイアル瓶に採取。等量のメタノールを加え、LC-MSで分析。検量線から被験物質濃度を算出。定量下限値:0.05mg/L				
結果の統計解析手法	各濃度区でのミジンコの遊泳阻害数と供試個体数(20頭)から遊泳阻害率(%)を算出し、binomial法により半数遊泳阻害濃度(EC50)を算出。また、その95%信頼限界も算出。binomial法(TOXDAT Multi-Method Program(米EPA)の計算式利用)				
試験条件					
試験生物の起源、前処理、繁殖方法	継代中のものから幼体を抱えた肉眼的に健康かつ十分な大きさの雌成体を選別して、別に用意したビーカーに移し、それぞれ翌日産出された幼体を別のビーカーに分けた。この幼体を供試ミジンコの親として、19日間じゅん化した。成熟し幼体を産むようになってから、1週間に少なくとも2回以上幼体を除去した。暴露開始前日に幼体を除去し、24時間以内に産出された幼体を試験に用いた。餌は <i>Chlorella vulgaris</i> を遠心操作により人工軟水に置換し、ミジンコ1頭当たり0.1～0.2mgC(有機炭素含量)/日与えた。人工軟水は蒸留水1L当たりCaCl ₂ ・2H ₂ O 26.1mg、MgSO ₄ ・7H ₂ O 17.7mg、K ₂ SO ₄ 1.1mg、NaHCO ₃ 25.0mgを溶解して調製した。				
参照物質での感受性試験結果	基準物質(重クロム酸カリウム)による急性遊泳阻害試験の結果、48時間EiC50は、0.90mg/Lであった。				
試験開始時の時間齢	24時間以内				
希釈水源	OECD改訂ガイドラインNo.211オオミジンコ繁殖阻害試験-1998年9月に記載のM4調整水				
希釈水の化学的性質	硬度:252mg/L(CaCO3換算)、pH:7.5				
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	被験物質300mg/L試験原液を希釈水に添加し、設定濃度の試験液を必要量調製した。試験液の状態を観察し、無色透明で沈殿などが無いことを確認した。				
試験物質の溶液中での安定性	試験開始時の被験物質濃度は0.4～3.9mg/Lであり、設定濃度(0.48～5.00mg/L)に対する実測濃度の割合は、74.7～84.5%であった。試験開始後48時間の被験物質濃度は0.4～3.7mg/Lであった。設定濃度(0.48～5.00mg/L)に対する実測濃度の割合は、66.9～75.0%であった。実測濃度が設定濃度の±20%を外れたので試験結果の算出には実測濃度の幾何平均値を用いた。				
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	使用せず				
暴露容器	100mL容ガラス容器(非密閉)				
暴露期間	48時間				
試験方式	止水				
連数、1連当たりの試験生物数	連数:4連/濃度区 生物数:20頭/濃度区(1連につき5頭で1濃度区20頭)				
対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質	変動なし(pH:7.2～7.6、DO:8.2～8.8mg/L、水温:20.2～20.7℃)				
試験温度範囲	20±1℃				
照明の状態	室内光、16時間明／8時間暗				
平均測定濃度の計算方法	各試験液容器より試験液0.2から1.0mLをバイアル瓶に採取。等量のメタノールを加え、LC-MSで分析。検量線から被験物質濃度を算出し、幾何平均を求めた(検出限界:0.02mg/L)。				
結果					
設定濃度	0, 0.48, 0.86, 1.54, 2.78, 5.00 mg/L				
実測濃度	試験液は、試験開始時および48時間後の試験液について、被験物質の濃度を分析した。				
	設定濃度 mg/L	測定濃度(mg/L)			
	0時間 新	設定濃度に対する%	48時間 旧	設定濃度に対する%	幾何平均(mg/L)
	0	<0.02	---	<0.02	---
	0.48	0.40	83.3	0.36	75.0
	0.86	0.65	75.6	0.62	72.1
	1.54	1.15	74.7	1.03	66.9
	2.78	2.35	84.5	2.08	74.8
	5.00	3.89	77.8	3.69	73.8
	新:新規に調製された試験液 旧:24時間暴露後の試験液				
遊泳阻害数	EC0(48hr)=0.63mg/L(実測) EC50(48hr)=1.24mg/L(実測) (95%信頼区間:0.63-2.21mg/L) EC100(48hr)=2.21mg/L(実測)				
累積遊泳阻害数の表	実測濃度 累積遊泳阻害数(死亡あるいは遊泳阻害率) (mg/L) 24hr 48hr Cont. 0(0) 0(0) 0.38 0(0) 0(0) 0.63 0(0) 0(0) 1.09 0(0) 0(0) 2.21 17(85) 20(100) 3.79 17(85) 20(100)				

注釈	試験結果に影響を与える事項は観察されなかった
対照区における反応は妥当か	はい
対照区における反応の妥当性の考察	48時間の試験期間において、対照区におけるミジンコの遊泳阻害率は0%であり、試験の妥当性クライテリアを満たした。
結論	
結果(48h-EC50)	EC0(48hr)=0.63mg/L(実測) EC50(48hr)=1.24mg/L(実測) EC100(48hr)=2.21mg/L(実測)
信頼性スコア	1. 制限なく信頼性あり
キースタディ	キースタディ
信頼性の判断根拠	本試験は、OECD TG 202に準拠して、GLPで実施された試験である。また試験結果に影響を与える要因はなく、試験計画書からの逸脱事項もなかった。
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1、文献9
備考	

4-3 水生植物への毒性(例えば藻類)

TOXICITY TO AQUATIC PLANTS e. g. ALGAE

試験物質	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	CAS No: 4016-24-4、純度: 96.6w/v%、不純物: α -スルホミリスチン酸ニナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)、ライオン株式会社、Lot:000203
方法	OECD Test Guideline 201「藻類生長阻害試験」(1984年)
GLP	はい
試験を行った年	2001
生物種、系統、供給者	生物種: <i>Selenastrum capricornutum</i> (<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>) 系統: ATCC-22662 ATCCより入手したものを試験機関にて無菌的に継代培養しているものを用いた。
エンドポイント	生長阻害の72h- $ErC50$ (生長速度法)
毒性値算出に用いたデータの種類	生長曲線下面積 生長速度
試験物質の分析の有無	あり
試験物質の分析方法	LC-MS(検出限界: 0.02mg/L) 暴露開始時は3連の試験容器より試験液各2.0mLをバイアル瓶に採取。試験終了時は3連の試験容器より試験液各5.0mLをバイアル瓶に採取、合わせて遠心分離する。その上澄み液2.0mL程度をバイアル瓶に採取。等量のメタノールを加え、LC-MSで分析。検量線から被験物質濃度を算出。定量下限値: 0.05mg/L
結果の統計解析手法	Bartlettの等分散検定、一元配置分散分析(ANOVA)およびDunnettの多重比較検定により対照区と比較して、有意差(5%水準)が認められない最高試験濃度を無影響濃度(NOEC)とした。
試験条件	
試験施設での藻類継代培養方法	無菌的に継代培養
藻類の前培養の方法及び状況	試験条件と同じ条件で暴露開始前に3日間培養したものを使用。培養後、顕微鏡観察を行い変形や異常な細胞が現れていないことを確認。
参照物質での感受性試験結果	基準物質(重クロム酸カリウム)による72時間の生長阻害濃度($EbC50$)は、0.41mg/L
希釈水源	
培地の化学的性質	OECD培地 暴露開始時pH7.2~7.4、試験終了時pH7.4~7.8
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	培地に被験物質を溶解して100mg/L溶液とし、これをろ過滅菌して被験物質原液とした。各試験液はろ過滅菌した培地に被験物質原液を加えることにより調製した。試験液は無色透明で沈殿などは見られなかった。
試験物質の溶液中での安定性	暴露開始時の被験物質濃度は0.14~9.75mg/Lであり、暴露72時間の被験物質濃度は0.11~8.31mg/Lであった。設定濃度(0.16~10mg/L)に対する割合は、暴露開始時が86.1~97.5%、暴露72時間が68.3~83.1%であった。暴露開始時の実測濃度が設定濃度の $\pm 20\%$ 以内であったため、試験結果の算出には設定濃度を用いた。
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	使用せず
暴露容器	通気性のシリコン栓付300mL容ガラス製三角フラスコ
暴露期間	72時間
試験方式	止水
連数	3連

各濃度区の少なくとも1連における 試験開始時と終了時の水質	試験培養液の温度変化 暴露時間(hr) 温度(°C)					

	0	23.0				
	24	24.2				
	48	24.2				
	72	24.9				

	試験培養液のpH					

	設定濃度(mg/L)	pH (0時間)		pH(72時間)		

0	7.4		7.8			
0.16	7.3		7.6			
0.36	7.3		7.5			
0.82	7.3		7.4			
1.89	7.2		7.4			
4.35	7.2		7.4			
10.0	7.2		7.4			

試験温度範囲	23±2℃					
照明の状態	4000～5000 lux（連続照明）					
平均測定濃度の計算方法	各試験容器を23±2℃の培養装置に設置して試験を開始し、24、48および72時間後に細胞濃度を測定した。細胞濃度の測定は各試験容器より試験液0.2mL～1.0mLを採取し、電解液（アイソトンⅡ）と混合して全量を20mLとした後、コールターカウンターにて計測した。					
結果						
設定濃度	0, 0.16, 0.36, 0.82, 1.89, 4.35, 10 mg/L					
実測濃度	試験培養液中の被験物質濃度および経時変化					

	設定濃度 (mg/L)	測定濃度 0時間 設定値に対する%		72時間 設定値に対する%		

	0	<0.02	—	<0.02	—	
	0.16	0.14	87.5	0.11	68.8	
	0.36	0.31	86.1	0.28	77.8	
	0.82	0.72	87.8	0.62	75.6	
	1.89	1.69	89.4	1.29	68.3	
	4.35	4.23	97.2	3.53	81.1	
10.0	9.75	97.5	8.31	83.1		

細胞密度（1）	暴露期間中の細胞濃度					

	設定濃度 容器番号	細胞濃度(細胞/mL)				
	[0時間の測定濃度]					

	(mg/L)	0時間	24時間	48時間	72時間	

	0	1	10000	23000	125000	961000
		2	10000	19000	124000	1012000
		3	10000	25000	121000	1072000
	平均	10000	22000	123000	1015000	
	SD	0	3200	2000	55700	

0.16	1	10000	21000	138000	959000	
[0.14]	2	10000	23000	143000	988000	
	3	10000	22000	123000	1000000	
	平均	10000	22000	135000	982000	
	SD	0	900	10200	21000	

0.36	1	10000	22000	135000	973000	
[0.31]	2	10000	23000	114000	949000	
	3	10000	25000	129000	918000	
	平均	10000	23000	126000	947000	
	SD	0	1400	10800	27600	

細胞密度(2)	0.82 [0.72]	1	10000	22000	121000	904000
		2	10000	27000	133000	1013000
		3	10000	18000	121000	835000
		平均	10000	22000	125000	917000
		SD	0	4500	7000	89700
	1.89 [1.69]	1	10000	21000	134000	1000000
		2	10000	21000	127000	916000
		3	10000	23000	123000	943000
		平均	10000	21000	128000	953000
		SD	0	1100	5400	42800
	4.35 [4.23]	1	10000	21000	103000	850000
		2	10000	21000	118000	903000
		3	10000	18000	108000	833000
		平均	10000	20000	110000	862000
		SD	0	1800	7800	36600
	10.0 [9.75]	1	10000	20000	107000	845000
		2	10000	20000	112000	755000
		3	10000	18000	119000	843000
		平均	10000	19000	113000	815000
		SD	0	1400	5800	51300
生長阻害率(%)	細胞増殖阻害率(%)の濃度変化					
	設定濃度 [0時間の測定濃度] (ug/L)	容器番号	生長曲線下面積 面積	生長速度 速度	阻害率(%) 阻害率(%)	阻害率(%) 阻害率(%)
			A(0-72h)	IA(0-72h)	μ(24-48h)	Im(24-48h)
				μ(24-48h)	Im(24-48h)	μ(24-72h)
					Im(24-72)	
	0	1	14470000	--	0.0704	--
		2	14970000	--	0.0788	--
		3	15770000	--	0.0658	--
		平均	15070000	--	0.0717	--
	0.16 [0.14]	1	14710000	--	0.0785	--
		2	15220000	--	0.0768	--
		3	14890000	--	0.0714	--
		平均	14940000	0.85	0.0756	-5.51
					0.0792	0.65
	0.36 [0.31]	1	14840000	--	0.0759	--
		2	14060000	--	0.0672	--
		3	14100000	--	0.0691	--
		平均	14330000	4.89	0.0708	1.27
					0.0775	2.89
	0.82 [0.72]	1	13680000	--	0.0717	--
		2	15410000	--	0.0660	--
		3	12760000	--	0.0787	--
		平均	13950000	7.43	0.0721	-0.65
					0.0775	2.81
	1.89 [1.69]	1	15100000	--	0.0777	--
		2	13930000	--	0.0751	--
		3	14200000	--	0.0703	--
		平均	14410000	4.36	0.0744	-3.75
					0.0791	0.89
	4.35 [4.23]	1	12560000	--	0.0672	--
		2	13580000	--	0.0724	--
		3	12420000	--	0.0759	--
		平均	12850000	14.71	0.0719	-0.26
					0.0789	1.11
	10.0 [9.75]	1	12590000	--	0.0697	--
		2	11650000	--	0.0711	--
		3	12800000	--	0.0788	--
		平均	12350000	18.07	0.0732	-2.13
					0.0778	2.47

各濃度区における生長曲線	<ul style="list-style-type: none"> ・対照区における細胞密度は72時間の培養で102倍に増殖し、試験条件下で正常な生長を示した。 ・最低濃度区(0.16mg/L)では72時間の培養で98倍に増殖し、対照区と同程度の生長を示した。 ・最高濃度区(10.0mg/L)では72時間の培養で81倍の増殖であり、わずかに生長阻害がみられた。 ・上記以外の4濃度区(0.36、0.82、1.89、4.35mg/L)では72時間培養で86～95倍の増殖であった。
その他観察結果	結果に影響を与える事項は観察されなかった
注釈	
対照区での生長は妥当か	はい
対照区における反応の妥当性の考察	対照区における細胞密度は72時間の培養で102倍に増殖し、妥当性の基準である16倍を越えた。
結論	
結果(ErC50)	ErC50(24-48h):>10.0mg/L (設定濃度) ErC50(24-72h):>10.0mg/L (設定濃度)
結果(NOEC)	NOECr(24-48h):>10.0mg/L (設定濃度) NOECr(24-72h):>10.0mg/L (設定濃度)
信頼性スコア	1. 制限なく信頼性あり
キースタディ	キースタディ
信頼性の判断根拠	本試験は、OECDテストガイドラインに準拠して、GLPで実施された試験である。また、試験結果に影響を与える要因はなく、試験計画書からの逸脱事項もなかった。
出典	OECD SIDS(SIAM16)
引用文献	文献1、文献10
備考	

4-4 微生物への毒性(例えばバクテリア)

TOXICITY TO MICROORGANISMS e. g. BACTERIA

4-5 水生生物への慢性毒性

CHRONIC TOXICITY TO AQUATIC ORGANISMS

A. 魚への慢性毒性

CHRONIC TOXICITY TO FISH

B. 水生無脊椎動物への慢性毒性

CHRONIC TOXICITY TO AQUATIC INVERTEBRATES

試験物質	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	CAS No: 4016-24-4、純度: 96.6w/v%、不純物: α -スルホミリスチン酸ニナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)、ライオン株式会社、Lot:000203
方法	OECD Test Guideline 211「オオミジンコ繁殖試験」(1998年)
GLP	はい
試験を行った年	2001
試験生物種	オオミジンコ(<i>Daphnia magna</i>)
試験物質の分析の有無	あり
試験物質の分析方法	LC-MS(検出限界: 0.02mg/L) 各試験容器より試験液を採取し等量のメタノールで希釈する。その1.0～2.0mLをバイアル瓶に採取。LC-MSで分析。検量線から被験物質濃度を算出。定量下限値: 0.05mg/L
エンドポイント	繁殖率
結果の統計解析手法	対照区と各濃度区についてBartlettの等分散検定、一元配置分散分析を行った。(EcoTox-Statics(Version1.1))
試験条件	
助剤使用の有無	なし
助剤の種類、濃度、助剤対照区の有無	
試験温度	20.0～20.8℃
pH	6.7～7.7
硬度	241～258mg/L (CaCO ₃ 換算)
試験生物の情報	<p>生物種: オオミジンコ(<i>Daphnia magna</i>) 起源: 独立行政法人 国立環境研究所より分譲され5年9ヶ月継代維持 供給者: 試験機関において繁殖飼育している個体を用いた 継代中のものから幼体を抱えた肉眼的に健康かつ十分な大きさの雌成体を選別して、別に用意したビーカーに移し、翌日に算出された幼体を別のビーカーに分けた。この幼体を供試ミジンコの親とした。成熟し幼体を産むようになったら、1週間に少なくとも2回以上幼体を除去した。3週目に入り暴露開始前日に、その前日間の死亡率が0%で、休眠卵や雄が発生しなかったバッチから、育苗内に幼体を持つ雌成体を選別し、翌日(24時間以内)産出された幼体を試験に用いた。</p> <p>対照区: 有 餌は <i>Chlorella vulgaris</i> を遠心操作により人工軟水に置換し、ミジンコ1頭当たり0.1～0.2mgC(有機炭素含量)/日与えた。人工軟水は蒸留水1L当たりCaCl₂·2H₂O 26.1mg、MgSO₄·7H₂O 17.7mg、K₂SO₄ 1.1mg、NaHCO₃ 25.0mgを溶解して調製した。</p>
希釈水源	OECD改訂ガイドラインNo.211オオミジンコ繁殖阻害試験—1998年9月採択に記載の調整水を用いた。

[illegible]

累積産仔数	実測濃度	累積産仔数 測定日(日)																			
		0	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21				
累積産仔数	対照	0	0	0.4	12.6	14.5	17.5	53.7	59.0	64.5	104.4	108.7	113.2	151.1	155.3	159.4	185.4				
	0.08	0	0	0.0	11.8	17.1	17.1	48.4	60.1	60.1	90.4	100.6	100.6	136.9	148.1	148.1	174.4				
	0.13	0	0	0.0	11.5	17.2	17.2	39.6	59.8	59.8	88.1	104.7	104.7	132.7	150.3	150.4	176.5				
	0.24	0	0	1.2	15.4	15.4	19.0	57.1	57.1	63.0	103.0	103.0	107.1	149.2	149.2	153.4	186.1				
	0.38	0	0	0.0	4.0	6.4	6.4	23.8	33.1	33.1	56.5	63.9	64.0	92.4	99.2	99.2	121.8				
	0.67	0	0	0.0	0.2	0.4	1.2	11.1	17.3	18.7	34.9	39.4	39.4	47.3	49.8	49.8	66.9				
	1.25	0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	9.3	17.3	20.5	34.0	40.8	42.5	54.5	55.8	55.8	71.5				
	親個体の死亡 LC50=1.12(95%信頼区間0.85-4.07:実測) 生殖阻害 EC50=0.70(95%信頼区間0.63-0.79:実測) NOEC=0.24(実測) LOEC=0.38(実測)																				
対照区における反応は妥当か	はい																				
生理的影響	試験結果に影響を与える事項はなかった																				
試験の妥当性	対照区での親ミジンコの死亡率は、暴露終了時で0%であり、試験成立条件である20%以下の基準を満たした。 また、対照区の21日間での親ミジンコ1頭当たりの平均累積産仔数は185.4頭であり、試験成立条件である60頭以上の基準を満たした。 21日間の暴露期間中の水温は20.0~20.8℃であり、設定範囲(20±1℃)内であった。 溶存酸素濃度は7.4~9.1mg/Lであり、全ての濃度区で飽和溶存酸素濃度の60%以上が維持された。 pHは6.7~7.7であり、被験物質濃度の増加と共にpHが上昇した。暴露試験期間中のpH変動は、被験物質によると推定された。 全硬度は241~258mg/L(CaCO3換算)であり、設定範囲(140mg/L)内であった。 以上のことから、水温、溶存酸素濃度、pHおよび全硬度についてはミジンコの生育条件として適切な範囲であったと思われる。																				
注釈																					
結論																					
結果(EC50)	21日間暴露の親ミジンコの半数致死濃度(LC50):1.12mg/L(95%信頼区間:0.85-4.07mg/L)(実測) 21日間暴露の50%繁殖阻害濃度(EC50):0.70mg/L(95%信頼区間:0.63-0.79mg/L)(実測)																				
結果(NOEC、LOEC)	親ミジンコ1頭あたりの累積産仔数に及ぼす21日間の最大無作用濃度(NOEC):0.24mg/L(実測)																				
信頼性スコア	1. 制限なく信頼性あり																				
キースタディ	キースタディ																				
信頼性の判断根拠	本試験は、OECDテストガイドラインに準拠して、GLPで実施された試験である。また、試験結果に影響を与える要因はなく、試験計画書からの逸脱事項もなかった。																				
出典	OECD SIDS(SIAM16)																				
引用文献	文献1、文献11																				
備考																					

4-6 陸生生物への毒性

TOXICITY TO TERRESTRIAL ORGANISMS

A. 陸生植物への毒性

TOXICITY TO TERRESTRIAL PLANTS

B. 土壌生物への毒性

TOXICITY TO SOIL DWELLING ORGANISMS

C. 他の非哺乳類陸生種(鳥類を含む)への毒性

TOXICITY TO OTHER NON-MAMMALIAN TERRESTRIAL SPECIES (INCLUDING AVIAN)

4-6-1底生生物への毒性

TOXICITY TO SEDIMENT DWELLING ORGANISMS

4-7 生物学的影響モニタリング(食物連鎖による蓄積を含む)

BIOLOGICAL EFFECTS MONITORING (INCLUDING BIOMAGNIFICATION)

4-8 生体内物質変換と動態

BIOTRANSFORMATION AND KINETICS

4-9 追加情報

ADDITIONAL INFORMATION

項目名 (同一の試験項目について複数の試験がある場合、当該項目行をコピー追加してください。)	データ入力欄
	黄色＝必須項目
	青＝任意項目
	紫＝一部の物質で必須項目

5-0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	<p>脂肪酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (Methyl Ester Sulfonate; 以下、MESと略す) は、脂肪酸メチルエステルの第2位の炭素にスルホン酸が付加した構造を有する陰イオン界面活性剤である。現在日本においてMESは主に脂肪酸鎖長の異なるヘキサデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C16-MES) とテトラデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C14-MES) の混合物として生産され、衣料用洗剤に使用されている。これまではC18の成分は工業的に生産されてこなかったが、界面活性剤としての性能等の面から、今後はオクタデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C18-MES) の生産量の増加が予測される。</p> <p>これら3物質は、疎水基に直鎖飽和脂肪酸炭化水素を有し、その炭素鎖長のみがC14、C16およびC18と異なる。</p> <p>MESと同様に疎水基に直鎖脂肪酸炭化水素を有する陰イオン系界面活性剤 (直鎖アルキルベンゼンスルホン酸 (LAS)、α オレフィンスルホン酸 (AOS) およびアルキルサルフェート (AS)) の環境中の分解や生体内の代謝は、炭素鎖長の違いにかかわらず脂肪酸炭化水素の末端がω酸化に続き炭素2分子単位でβ酸化が起こるといった共通のメカニズムに基づくことが知られている。したがって、今回評価対象とする3物質についても、これらの陰イオン系界面活性剤と同様のメカニズムにしたがって環境中の分解、生体内での代謝を受けるものと推察され、環境中運命や毒性学的挙動における類似性が高いと考えられる。したがって、これら3物質をMES類という一つのカテゴリーとして取り扱うのが適切であると考えられる。</p> <p>MESについてのSIDS項目データについてはC14-MESおよびC16-MES (OECD SIAM16において“no further work”と評価済み) について整備されている。また、C18-MESのハザード評価及び考察においては、C14-MESおよびC16-MESのデータに加えて、化学構造や物性が類似した陰イオン界面活性剤 (直鎖アルキルベンゼンスルホン酸 (LAS)、アルキルサルフェート (AS)) の包括的なデータにより付加的あるいは周辺情報が利用できる。</p> <p>したがって、これらカテゴリー物質および陰イオン界面活性剤の構造、毒性メカニズム、毒性学的な体内動態、代謝経路および毒性学的な類似性を基に、C18-MESの毒性評価を行うことが可能と考えられる。</p>
-------------	--

5-1 トキシコキネティクス、代謝、分布

TOXICOKINETICS, METABOLISM, and DISTRIBUTION

5-2 急性毒性

ACUTE TOXICITY

A. 急性経口毒性

ACUTE ORAL TOXICITY

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt	
CAS番号	4016-24-4	
純度等	純度: 96.6w/v%, Lot: 000203	
注釈	α -スルホミリスチン酸二ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)	
方法	OECD401	
方法／ガイドライン		
GLP適合	はい	
試験を行った年	2002	
試験系(種／系統)	Rat	
性別(雄:M、雌:F)	MF	
投与量	2400, 1920, 1536, 1229, 983, 786, 0 mg/kg	
各用量群(性別)の動物数	5	
溶媒(担体)	オリーブオイル	
投与経路	強制経口投与	
観察期間(日)	14	
その他の試験条件		
統計学的処理	LD50値およびその95%信頼限界は、死亡率を基に、プロビット法を用いて算出した。	
結果		
各用量群での死亡数	用量	死亡数
	mg/kg	M F
	786	0/5 0/5
	983	1/5 0/5
	1229	0/5 0/5
	1536	1/5 3/5
	1920	1/5 2/5
	2400	4/5 4/5

臨床所見	被験物質群の雌雄に共通して、投与直後から自発運動の低下が認められ、1～3時間からは眼瞼下垂および下痢便の排泄が認められた。さらに、投与後3～6時間からは糞尿による下腹部被毛の汚れおよび立毛が認められた。死亡動物の多くは、これらの症状が重度化して次第に呼吸が脆弱化し、投与後6～24時間の間に死亡した。生存動物の症状は、投与翌日から回復傾向が認められ、投与後6日までに全て回復した。
剖検所見	投与後6～24時間の死亡例では、雌雄とも多くの例で水溶内容物の充満による胃の拡張が認められた。投与後4日の死亡例および生存動物では肉眼的変化は認められなかった。
その他	雌雄とも投与翌日に、対照群に比べて、概ね用量に依存して体重増加の抑制ないし減少が認められた。しかし、投与後3日には回復傾向を示し、症状が回復した7日目以降は順調な体重増加が認められた。
結論	
LD50値又はLC50値	雄: LD50(95%信頼限界) = 2142(1656-6654) mg/kg 雌: LD50(95%信頼限界) = 1819(1347-3170) mg/kg
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等	著しい性差は観察されなかった
注釈	(財)畜産生物科学安全研究所
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS(SIAM16)、化学物質毒性試験報告書Vol9(2002)
引用文献(元文献)	文献1、文献12、文献13
備考	

試験物質名	混合物(Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltを約70%含むfatty acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt)										
CAS番号	4016-24-4										
純度等	混合物として、70%										
注釈	炭素鎖長の異なる脂肪酸2-スルホ、1-メチルエステルのナトリウム塩を不純物として含む										
方法											
方法／ガイドライン	Other										
GLP適合	いいえ										
試験を行った年	1990										
試験系(種／系統)	Rat Crj: CD(SD)										
性別(雄:M、雌:F)	M										
投与量	350, 700, 1400 mg/kg										
各用量群(性別)の動物数	5										
溶媒(担体)	蒸留水										
投与経路	強制経口投与										
観察期間(日)	14										
その他の試験条件	6週齢の動物を用いた。各群に対して、10w/v%溶液をそれぞれ5、10、20mL/kg投与した										
統計学的処理											
結果											
各用量群での死亡数	<table> <tr> <th>用量</th><th>死亡数</th></tr> <tr> <th>mg/kg</th><th>M</th></tr> <tr> <td>350</td><td>0/5</td></tr> <tr> <td>700</td><td>0/5</td></tr> <tr> <td>1400</td><td>4/5</td></tr> </table>	用量	死亡数	mg/kg	M	350	0/5	700	0/5	1400	4/5
用量	死亡数										
mg/kg	M										
350	0/5										
700	0/5										
1400	4/5										
臨床所見	350mg/kg群の3/5例、700mg/kg群の全例に投与当日に下痢が認められたが翌日以降は全例が回復した。1400mg/kg群は、投与当日に下痢、自発運動の低下、立毛が全例に認められ、投与翌日に4例が死亡した。										
剖検所見	350、700mg/kgの2例に前胃の赤色化、700、1400mg/kgの1例に前胃粘膜の肥厚を認める。死亡例では、胃および小腸の溶解と粘調液貯留										
その他	投与翌日に1400mg/kgの4/5例が死亡。生存例の体重増加量には、変化なし。										
結論											
LD50値又はLC50値	700～1400mg/kg										
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等											
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター										
信頼性	2 制限付きで信頼性あり										
信頼性の判断根拠	ガイドラインに従わない、非GLP試験であるが、科学的に急性経口毒性の評価が可能										
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ										
引用文献(元文献)	文献1										
備考											

B. 急性吸入毒性

ACUTE INHALATION TOXICITY

C. 急性経皮毒性

ACUTE DERMAL TOXICITY

D. 急性毒性(その他の投与経路)
ACUTE TOXICITY、OTHER ROUTES

5-3 腐食性/刺激性
CORROSIVENESS/IRRITATION

A. 皮膚刺激/腐食
SKIN IRRITATION/CORROSION

試験物質名	混合物 (Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt: Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt=80:20)				
CAS番号	4016-24-4				
純度等	混合物として、61.2%				
注釈	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS:4016-22-2): 約12.2%、残分(メチル硫酸ナトリウム、ミリスチン酸メチル、パルミチン酸メチル、水分等): 約38.8%				
pH	不明				
方法					
方法／ガイドライン	皮膚一次刺激性試験(開放適用)				
GLP適合	いいえ				
試験を行った年	1993				
試験系(種／系統)	Guinea Pig Hartley				
性別(雄:M、雌:F)	F				
投与量	0.03mL, 32.7, 16.3, 8.2, 3.3%(w/v)				
各用量群(性別)の動物数	2				
溶媒(担体)	蒸留水				
投与経路	経皮(毛刈りした健常皮膚に被験物質を塗布)				
観察期間(日)	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 日				
その他の試験条件	動物の週齢:6週齢 投与容量:0.03mL/2×2cm 判定基準:Draize法(下記) 紅斑および痂皮 紅斑なし -----0 紅斑極弱い(わずかにみとめられる程度) -----1 紅斑明瞭 -----2 紅斑中程度～強度 -----3 紅斑極めて強度～結痂 -----4 浮腫 浮腫なし -----0 浮腫形成極く軽度(わずかに認められる程度) -----1 浮腫形成軽度 -----2 浮腫形成中程度(膨隆1mm) -----3 浮腫形成強度(膨隆1mm以上、検体適用部位以外にも広がる) ---4				
統計学的処理					
結果					
一次刺激スコア	算定せず				
皮膚反応等	処置濃度(%) 観察(hr) 32.7 16.3 8.2 3.3 24 0.5 0.5 1.0 0 48 0.5 0.5 0.5 0 72 0.5 0.5 0.5 0 96 0.5 0.5 0.5 0 120 0 0 0.5 0 144 0 0 0 0 168 0 0 0 0				
その他					
結論					
皮膚刺激性	あり				
皮膚腐食性	なし				
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター				
信頼性	2 制限付きで信頼性あり				
信頼性の判断根拠	ガイドラインに従わない、非GLP試験であるが、科学的に皮膚刺激性評価が可能				
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ				
引用文献(元文献)	文献1				
備考					

試験物質名	混合物 (Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt: Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt=70:30)
CAS番号	4016-24-4
純度等	混合物として、62.4%
注釈	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS:4016-22-2): 約18.7%、残分(メチル硫酸ナトリウム、ミリスチン酸メチル、パルミチン酸メチル、水分等): 37.6%

pH	不明
方法	
方法／ガイドライン	皮膚一次刺激性試験（開放適用）
GLP適合	いいえ
試験を行った年	1993
試験系（種／系統）	Guinea Pig Hartley
性別（雄：M、雌：F）	F
投与量	0.03mL, 32.5, 16.0, 8.0, 3.2%(w/v)
各用量群（性別）の動物数	2
溶媒（担体）	蒸留水
投与経路	経皮（毛刈りした健常皮膚に被験物質を塗布）
観察期間（日）	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 日
その他の試験条件	動物の週齢：6週齢 投与容量：0.03mL/2×2cm 判定基準：Draize法（下記） 紅斑および痂皮 紅斑なし -----0 紅斑極弱い（わずかにみとめられる程度） -----1 紅斑明瞭 -----2 紅斑中程度～強度 -----3 紅斑極めて強度～結痂 -----4 浮腫 浮腫なし -----0 浮腫形成極く軽度（わずかに認められる程度） -----1 浮腫形成軽度 -----2 浮腫形成中程度（膨隆1mm） -----3 浮腫形成強度（膨隆1mm以上、検体適用部位以外にも広がる） ----4
統計学的処理	
結果	
一次刺激スコア	算定せず
皮膚反応等	処置濃度（％） 観察(hr) 32.5 16.0 8.0 3.2 24 1.0 0.5 0.5 0 48 1.0 0.5 0 0 72 1.0 0.5 0 0 96 1.0 0.5 0 0 120 1.0 0 0 0 144 0.5 0 0 0 168 0 0 0 0
その他	
結論	
皮膚刺激性	あり
皮膚腐食性	なし
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター
信頼性	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	ガイドラインに従わない、非GLP試験であるが、科学的に皮膚刺激性評価が可能
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ
引用文献（元文献）	文献1
備考	

B. 眼刺激／腐食
EYE IRRITATION/CORROSION

5-4 皮膚感作
SKIN SENSITISATION

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	純度: 96.6w/v%, Lot:000203
注釈	α-スルホミリスチン酸二ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	
方法／ガイドライン	OECD429
試験のタイプ	in vivo
GLP適合	いいえ
試験を行った年	2003
試験系(種／系統)	Mouse CBA/J
性別(雄:M、雌:F)	F
投与量	25μL/ear, 5,10,25%

各用量群(性別)の動物数	4
溶媒(担体)	選択してください dimethylformamide
投与経路	経皮
観察期間(日)	3
その他の試験条件	9~10週齢
統計学的処理	各群の平均dpm値および標準偏差を求めた。
結果	
試験結果	濃度 平均±SD SI値 0 299.4±101.7 - 5% 338.1±137.4 1.1 10% 671.0±475.8 2.2 25% 405.5±225.8 1.4 SI: Stimulation Index
その他	
結論	
感作性	陰性
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター
信頼性	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDガイドラインに基づき、非GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ
引用文献(元文献)	文献1
備考	

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	純度:96.6w/v%, Lot:000203
注釈	α-スルホミリスチン酸ニナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	
方法/ガイドライン	OECD406
試験のタイプ	in vivo
GLP適合	はい
試験を行った年	2003
試験系(種/系統)	Guinea Pig Hartley
性別(雄:M、雌:F)	M
投与量	5, 2%
各用量群(性別)の動物数	10
溶媒(担体)	蒸留水
投与経路	経皮
観察期間(日)	24, 48hr
その他の試験条件	動物の週齢:6週齢 アジュバント使用 皮膚感作条件 ・皮内注射濃度:0.1% ・48hrクローズドパッチ:5% 惹起条件 ・24hrクローズドパッチ:5、2% 観察時間 ・24、48時間
統計学的処理	
結果	
試験結果	皮膚反応なし
その他	
結論	
感作性	陰性
注釈	Centre de Recherches Biologiques (CERB)
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	社内データ
引用文献(元文献)	
備考	

5-5 反復投与毒性

REPEATED DOSE TOXICITY

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	純度: 96.6w/v%, Lot:000203、
注釈	α -スルホミリスチン酸ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	
方法／ガイドライン	投与量設定試験
GLP適合	いいえ
試験を行った年	2002
試験系(種／系統)	Rat Crj: CD(SD)IGS
性別(雄:M、雌:F)	MF
投与量	0, 30, 100, 300, 500, 1000 mg/kg
各用量群(性別)の動物数	4
溶媒(担体)	オリーブオイル
投与経路	強制経口投与
対照群に対する処理	溶媒投与、試験群と同様に処理
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)	14
投与頻度	1日1回投与
回復期間(日)	無
試験条件	投与7日の夕方から交尾が成立するまで、雌雄各1匹ずつを同居させた。
統計学的処理	
結果	
体重、体重増加量	1000mg/kg群で体重の減少を認めた
摂餌量、飲水量	1000mg/kg群で摂餌量の減少を認めた
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	500mg/kg群で、雌雄に軽度な軟便、1000mg/kg群で雌雄に下痢、自発運動の低下が認められた。
眼科学的所見(発生率、重篤度)	検査せず
血液学的所見(発生率、重篤度)	1000mg/kgで雌雄に血小板数の増加、活性化トロンボプラスチン時間の短縮が認められた。
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	500mg/kg群で、雄にGPTの増加、1000mg/kg群で雌雄にGPTの増加、血糖値の減少、雌に尿素窒素の減少が認められた。
尿検査所見(発生率、重篤度)	検査せず
死亡数(率)、死亡時間	1000mg/kg群で雄3匹、雌1匹の死亡が認められた。
剖検所見(発生率、重篤度)	100mg/kg以上の群で雌雄に前胃の粘膜肥厚および表面粗さ、1000mg/kg群の死亡例で雌雄に胃の液状物貯留による膨満、前胃の粘膜剥離、腺胃の粘膜黒色点、腸の粘液様物貯留が認められた。
臓器重量	測定せず
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	検査せず
実際に摂取された量	0, 30, 100, 300, 500, 1000mg/kg
用量反応性	あり
注釈	反復経口投与毒性・生殖発生毒性併合試験(TG422)のための予備検討 交尾能に対する影響なし
結論	
NOAEL (NOEL)	5
LOAEL (LOEL)	300
NOAEL/LOAELの推定根拠	前胃粘膜の肥厚を、100mg/kgの雄雌に認めたため、確実に毒性が発現すると予測される300mg/kgを本試験の最高用量として設定。
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等	著しい性差は観察されなかった
注釈	(財)畜産生物科学安全研究所
信頼性	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づくGLP試験のために実施された予備検討
出典	化学物質毒性試験報告書Vol9(2002)
引用文献(元文献)	文献12、文献14
備考	

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	純度: 96.6w/v%, Lot:000203、
注釈	α -スルホミリスチン酸ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	
方法／ガイドライン	OECD422
GLP適合	はい
試験を行った年	2002

試験系(種／系統)	Rat																								
性別(雄:M、雌:F)	Crj: CD(SD)IGS																								
投与量	0, 5, 20, 80, 300 mg/kg																								
各用量群(性別)の動物数	10																								
溶媒(担体)	オリーブオイル																								
投与経路	強制経口投与																								
対照群に対する処理	溶媒投与、試験群と同様に処理																								
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)	47																								
投与頻度	1日1回投与																								
回復期間(日)	無																								
試験条件	10週齢で試験に使用 投与液量:5mL/kg 投与は、テフロン製胃ゾンデを装着した注射筒を用いて1日1回、交配開始14日前から雄は47日間、雌は分娩後の哺育4日(42～45日間)まで、経口投与した。																								
統計学的処理	パラメトリックデータは、Bartlettの分散検定を行い、分散が一樣な場合は一元配置の分散分析を行った。分散が一樣でない場合およびノンパラメトリックデータは、Kruskal-Wallisの順位検定を行った。それらの結果、有意差を認めた場合、Dunnett法またはScheffe法(群の大きさが異なる場合)により対照群に対する各群の比較検定を行った。カテゴリカルデータは、生殖発生毒性に関するパラメーターは、 χ^2 検定を、病理学的検査における異常例の出現率にはFisherの直接確率法を用いた、なお、新生児に関するデータは、1腹当たりの平均を1標本とした。																								
結果																									
体重、体重増加量	統計学的有意差なし																								
摂餌量、飲水量	統計学的有意差なし																								
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	軽度な軟便が、投与11日から15日にかけて、80mg/kg群で雌雄の各1匹、300mg/kg群で雌雄の各3匹に認められた。 アニオン系界面活性剤のラットへの経口投与により、下痢の発現することが知られている。本試験においても、80および300 mg/kg群の雌雄の一部の例に、軟便が認められたが、一過性の軽度な変化で、腸には病理組織学的変化は認められず、体重にも変化が認められなかった。したがって、本試験で認められた軟便は、有害性の観点からは、ほとんど問題にならない変化と判断されると試験責任者は考察している。																								
眼科学的所見(発生率、重篤度)	検査せず																								
血液学的所見(発生率、重篤度)	統計学的有意差なし																								
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	雄の300mg/kg群において、有意なGPTの高値およびトリグリセライドの低値をみとめた <table><tr><td>投与量(mg/kg)</td><td>0</td><td>5</td><td>20</td><td>80</td><td>300</td></tr><tr><td>動物数</td><td>10</td><td>10</td><td>9</td><td>10</td><td>10</td></tr><tr><td>GPT</td><td>41±4</td><td>40±6</td><td>38±3</td><td>44±6</td><td>53±7**</td></tr><tr><td>トリグリセライド</td><td>63±28</td><td>43±18</td><td>50±22</td><td>49±18</td><td>29±13*</td></tr></table> *:p<0.05、**:p<0.01 雌:統計学的有意差なし GPTの増加については、軽度な変化であったが本系ラットの背景データにおける正常範囲をやや上回る異常値であり、また投与量設定試験においても同様の変化が認められていることから、被験物質の投与に起因する変化と判断される。しかしながら、肝臓には病理組織学的変化は認められず、他に関連する変化も認められなかった。 一方、トリグリセライドの変化については、本被験物質の界面活性剤としての性質と関連して、脂質の吸収に影響する可能性が考えられるものの、変化は背景データにおける正常範囲内のごく軽度なもので、毒性学的意義は小さいものと考えられると試験責任者は考察している。	投与量(mg/kg)	0	5	20	80	300	動物数	10	10	9	10	10	GPT	41±4	40±6	38±3	44±6	53±7**	トリグリセライド	63±28	43±18	50±22	49±18	29±13*
投与量(mg/kg)	0	5	20	80	300																				
動物数	10	10	9	10	10																				
GPT	41±4	40±6	38±3	44±6	53±7**																				
トリグリセライド	63±28	43±18	50±22	49±18	29±13*																				
尿検査所見(発生率、重篤度)	統計学的有意差なし																								
死亡数(率)、死亡時間	20mg/kg群で、雄の1匹が投与過誤により死亡した。																								
剖検所見(発生率、重篤度)	前胃粘膜の肥厚を、80mg/kgの雄6/10および雌10/10、300mg/kgの雄10/10および雌9/9例に認める。 一般に、アニオン系界面活性剤は他の界面活性剤と同様に局所刺激性を有し、本被験物質についても、ラットへの反復経皮投与により、局所刺激性反応が認められている。したがって、本試験で認められた前胃の変化は、局所的な障害による炎症および上皮の反応性増殖と解せられると試験責任者は考察している。																								
臓器重量	統計学的有意差なし																								

病理組織学的所見(発生率、重篤度)	<p>80、300mg/kg処置群の雌雄に扁平上皮過形成、潰瘍、粘膜下組織および粘膜あるいはその両方の浮腫と炎症細胞浸潤</p> <p>用量(mg/kg bw/day)</p> <p>雄(n=5) 0 5 20 80 300</p> <p>前胃扁平上皮過形成</p> <p>- 5 5 5 1 0</p> <p>+,+,+++ 0 0 0 4* 5**</p> <p>浮腫 - 5 5 5 5 2</p> <p>+,++ 0 0 0 0 3</p> <p>粘膜下の浮腫</p> <p>- 5 5 5 2 1</p> <p>+,++ 0 0 0 3 4*</p> <p>粘膜下への炎症細胞浸潤</p> <p>- 5 5 5 5 1</p> <p>+,++ 0 0 0 0 4*</p> <p>雌(n=5) 0 5 20 80 300</p> <p>前胃扁平上皮過形成</p> <p>- 5 5 5 1 0</p> <p>+++ 0 0 0 4* 5**</p> <p>潰瘍 - 5 5 5 5 4</p> <p>++ 0 0 0 0 1</p> <p>粘膜下浮腫</p> <p>- 5 5 5 3 0</p> <p>+++ 0 0 0 2 5**</p> <p>粘膜下への炎症細胞浸潤</p> <p>- 5 5 5 4 3</p> <p>+ 0 0 0 1 2</p> <p>Note:-, Not detected; +,slight; ++,moderate;**,severer</p> <p>NOEL設定根拠</p>
実際に摂取された量	0, 5, 20, 80, 300
用量反応性	あり
注釈	
結論	
NOAEL (NOEL)	20
LOAEL (LOEL)	80
NOAEL/LOAELの推定根拠	前胃粘膜の肥厚を、80mg/kgの雄雌に認める
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等	著しい性差は観察されなかった
注釈	(財)畜産生物科学安全研究所
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS (SIAM16)、化学物質毒性試験報告書Vol9(2002)
引用文献(元文献)	文献1、文献12、文献14
備考	

試験物質名	混合物 (Decanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt: Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt: Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt=10:20:70)
CAS番号	4016-24-4
純度等	混合物として、70.3%
注釈	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt: 約14% Decanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt: 約7.0%
方法	
方法／ガイドライン	化審法ガイドライン
GLP適合	いいえ
試験を行った年	1990
試験系(種／系統)	Rat Crj: CD(SD)
性別(雄:M、雌:F)	MF
投与量	0、2.1、7.1、21.4%
各用量群(性別)の動物数	5
溶媒(担体)	蒸留水
投与経路	経皮
対照群に対する処理	溶媒投与、試験群と同様に処理
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)	29
投与頻度	1日1回投与

回復期間(日)	無
試験条件	動物:6週齢で試験に使用 投与は1日1回行い、雄は28日間、雌は29日間連日行った。 1mLのディスプレイ注射筒に投与検体液を採り、0.2mL/匹/日の割合で背部投与部位の皮膚(3×4cm)に均一に塗布した。
統計学的処理	
結果	
体重、体重増加量	統計学的有意差なし
摂餌量、飲水量	統計学的有意差なし
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	15%被験物質投与群の雌および雄の投与部位皮膚に一次刺激性による極軽度な皮膚反応が観察され、病理組織学検査でも表皮の肥厚が認められたが、一般毒性症状観察ではいずれの群においても投与に起因すると考えられる影響は認めなかった。
眼科学的所見(発生率、重篤度)	検査せず
血液学的所見(発生率、重篤度)	統計学的有意差なし
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	統計学的有意差なし
尿検査所見(発生率、重篤度)	統計学的有意差なし
死亡数(率)、死亡時間	死亡例なし
剖検所見(発生率、重篤度)	15%被験物質投与群の雌および雄の投与部位皮膚に一次刺激性による極軽度な皮膚反応が観察
臓器重量	統計学的有意差なし
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	15%被験物質投与群の雌および雄の投与部位皮膚に表皮の肥厚が認められた
実際に摂取された量	不明
用量反応性	あり
注釈	
結論	
NOAEL (NOEL)	NOAEL:15%
LOAEL (LOEL)	LOAEL:15%
NOAEL/LOAELの推定根拠	投与部位の皮膚一次刺激性
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等	著しい性差は観察されなかった
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター
信頼性	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	化審法ガイドラインに基づき、非GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS (SIAM16)、社内データ
引用文献(元文献)	文献1
備考	

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	純度:96.6w/v%、Lot:000203
注釈	α-スルホミリスチン酸ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	
方法／ガイドライン	OECD407
GLP適合	はい
試験を行った年	2001
試験系(種／系統)	Rat Crj: CD(SD)IGS
性別(雄:M、雌:F)	MF
投与量	雄:0, 80.7, 230.5, 902.4 mg/kg 雌:0, 73.1, 214.8, 865.8 mg/kg
各用量群(性別)の動物数	5
溶媒(担体)	SDS Rat and Mouse No. 1 modified Maintenance Diet
投与経路	混餌投与
対照群に対する処理	溶媒投与、試験群と同様に処理
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)	28
投与頻度	混餌投与による自由摂取
回復期間(日)	無
試験条件	5週齢で試験に使用
統計学的処理	Bartlettの分散検定を行い、分散が一樣な場合は、用量相関性に対してF1の単調増加性検定を行い、単調増加性を認める場合にはWilliam'sテストを行った。単調増加性が認められない場合は、Dunnett試験を行った。分散が一樣でない場合は、対数および逆正弦変換を行い、Bartlettの分散検定を行った。変換によっても分散が一樣でない場合は、ノンパラメトリックテストを行った。用量相関性に対してH1の単調増加性検定を行い、単調増加性を認める場合にはShirley'sテストを行った。単調増加性が認められない場合は、Dun'sテストを行った。

結果	
体重、体重増加量	雄の902.4mg/kg群で投与1週目に体重増加量の低値を認めた(p<0.05)。以降は正常に増加した。
摂餌量、飲水量	統計学的有意差なし
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	臨床所見なし
眼科学的所見(発生率、重篤度)	検査せず
血液学的所見(発生率、重篤度)	雄の902.4mg/kg群において、有意なPTの延長を認めた 投与量(mg/kg) 0 80.7 230.2 902.4 PT 12.5±0.93 13.2±0.34 13.2±0.58 13.9±0.76** 雌の865.8mg/kg群において、有意なMCHCの低下を認めた 投与量(mg/kg) 0 73.1 214.8 865.8 MCHC 35.1±0.21 35.2±0.30 35.0±0.29 34.7±0.22* *:p<0.05、**:p<0.01
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	雄の902.4mg/kg群において、有意な尿素およびカリウムの高値を認めた 投与量(mg/kg) 0 80.7 230.2 902.4 尿素 4.95±0.562 4.49±0.868 4.38±0.734 7.80±1.981** カリウム 3.6±0.19 3.6±0.31 3.7±0.11 4.0±0.05** 雌の865.8mg/kg群において、有意なALTおよびアルブミンの高値を認めた 投与量(mg/kg) 0 73.1 214.8 865.8 ALT 38±7.0 38±3.0 40±5.7 57±8.6** Alb 35±0.5 35±1.5 36±1.0 38±1.5** ** :p<0.01
尿検査所見(発生率、重篤度)	検査せず
死亡数(率)、死亡時間	死亡例なし
剖検所見(発生率、重篤度)	所見なし
臓器重量	雄 230.5mg/kg投与群以上で肝臓の相対重量の増加 <相対重量>

5-6 *in vitro* 遺伝毒性
GENETIC TOXICITY IN VITRO
A. 遺伝子突然変異
GENE MUTATION

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	純度: 96.6w/v%, Lot: 000203
注釈	α-スルホホミリスチン酸二ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	
方法/ガイドライン	OECD471
GLP適合	はい
試験を行った年	2002
細胞株又は検定菌	S. typhimurium 4種(TA 1535 & TA 1537 & TA 98 and TA 100) E.coli WP2 uvr A,
代謝活性化(S9)の有無	有

試験条件	<用量> $\mu\text{g}/\text{plate}$ 代謝活性化によらない場合 TA100, TA1535, TA1537 : 0, 0.625, 1.25, 2.5, 5, 10, 20 WP2 uvrA : 0, 156, 313, 625, 1250, 2500, 5000 TA98 : 0, 3.13, 6.25, 12.5, 25, 50, 100 代謝活性化による場合 TA100 : 0, 62.5, 125, 250, 500, 1000, 2000 TA1537 : 0, 31.3, 62.5, 125, 250, 500, 1000 TA1535, TA98 : 0, 6.25, 12.5, 25, 50, 100, 200 WP2 uvrA : 0, 156, 313, 625, 1250, 2500, 5000 <溶媒>DMSO <陽性対照>2-(2-Furyl)-3-(5-nitro-2-furyl)acrylamide(AF2) 和光純薬工業(株)、2-Aminoanthracene (2AA) 和光純薬工業(株)、NaN3:アジ化ナトリウム和光純薬工業(株)、9-アミノアクリジン (Aldrich Chemical Co.)、溶媒:AF2、2AAはDMSO和光純薬工業(株)、NaN3および9AAは蒸留水 (株)大塚製薬工場
結果	
細胞毒性	
代謝活性ありの場合	生育阻害発現濃度 ($\mu\text{g}/\text{plate}$) TA100:2000、TA1537:500、TA1535、TA98:200、WP2 uvrA:生育阻害認めず
代謝活性なしの場合	生育阻害発現濃度 ($\mu\text{g}/\text{plate}$) TA100、TA1535、TA1537:20、TA98:100、WP2 uvrA:生育阻害認めず
変異原性	
代謝活性ありの場合	試験した全ての用量で変異原性は認められなかった
代謝活性なしの場合	試験した全ての用量で変異原性は認められなかった
注釈	特記事項なし
結論	
遺伝子突然変異	陰性
注釈	(財)畜産生物科学安全研究所
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS(SIAM16)、化学物質毒性試験報告書Vol9(2002)
引用文献(元文献)	文献1、文献12、文献15
備考	

試験物質名	混合物 (Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltを約70%含むfatty acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt)
CAS番号	4016-24-4
純度等	混合物として、86.1%
注釈	炭素鎖長の異なる脂肪酸2-スルホ、1-メチルエステルのナトリウム塩を不純物として含む
方法	
方法/ガイドライン	OECD471
	OECD472
GLP適合	いいえ
試験を行った年	1990
細胞株又は検定菌	S. typhimurium 4種(TA 1535 & TA 1537 & TA 98 and TA 100) E.coli WP2 uvr A,
代謝活性化(S9)の有無	有
試験条件	<用量> $\mu\text{g}/\text{plate}$ 代謝活性化によらない場合 TA98, TA100, TA1535 : 0.4 ~ 50 (公比2で8段階) TA1537 : 0.04 ~ 10 (公比2で9段階) WP2 uvrA : 39 ~ 5000 (公比2で8段階) 代謝活性化による場合 TA98, TA100, TA1537 : 4 ~ 500 (公比2で8段階) TA1535 : 31 ~ 1000 (公比2で6段階) WP2 uvrA : 39 ~ 5000 (公比2で8段階) <溶媒>蒸留水 <陽性対照>2-(2-Furyl)-3-(5-nitro-2-furyl)acrylamide(AF2) 和光純薬工業(株)、N-Ethyl-N'-nitro-N-nitrosoguanidine(ENNG) ナカライテスク(株)、Acridine haltmustard(ICR-191) POLYSCIENCES、2-Aminoanthracene (2AA) 和光純薬工業(株)、溶媒:DMSO
結果	
細胞毒性	
代謝活性ありの場合	TA98, TA1537 : 250 $\mu\text{g}/\text{plate}$ 以上 TA100, TA1535 : 500 $\mu\text{g}/\text{plate}$ 以上 WP2 uvrA : 5000 $\mu\text{g}/\text{plate}$ 以上で毒性なし
代謝活性なしの場合	TA98, TA100, TA1535 : 25 $\mu\text{g}/\text{plate}$ 以上 TA1537 : 1.3 $\mu\text{g}/\text{plate}$ 以上 WP2 uvrA : 5000 $\mu\text{g}/\text{plate}$ 以上で毒性なし
変異原性	
代謝活性ありの場合	試験した全ての用量で変異原性は認められなかった

代謝活性なしの場合	試験した全ての用量で変異原性は認められなかった
注釈	特記事項なし
結論	
遺伝子突然変異	陰性
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター
信頼性	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、非GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ
引用文献(元文献)	文献1
備考	

B. 染色体異常

CHROMOSOMAL ABERRATION

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	純度: 96.6w/v%、Lot:000203
注釈	α -スルホミリスチン酸ニナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	
方法/ガイドライン	OECD473
GLP適合	はい
試験を行った年	2002
細胞株	選択してください Chinese Hamster Lung(CHL)
代謝活性化(S9)の有無	有
試験条件	<p><用量>短時間処理法(S9-あるいは+、6時間処理-18時間回復): 31.3、62.5、125、187.5、250 μg/mL 連続処理法(S9-、24時間連続処理): 15.6、31.3、62.5、125、187.5、250 μg/mL</p> <p><溶媒>生理食塩液</p> <p><陽性対照>1-methyl-3-nitro-1-nitrosoguanidine(MNNG) Aldrich Chemical Co., Benzo(a)pyrene Sigma Chemical Co.,</p> <p>処理濃度 短時間処理-S9: MNNG 2.5 μg/mL 短時間処理+S9: Benzo(a)pyrene 10 μg/mL 連続処理: MNNG 2.5 μg/mL</p> <p><記録>用量あたり200個(各ディッシュ当たり100個)の分裂中期像について染色体を観察した。染色体の分析は、日本環境変異原学会哺乳動物試験分科会(NNS)による分類法に基づいて、染色体型あるいは染色分体型の切断、交換などの構造異常と倍数性細胞(Polyoloid)の有無について観察した。</p> <p><陽性判定>染色体構造異常細胞および倍数性細胞の出現頻度について、多試料 χ^2 検定を行い有意差(有意水準5%以下)が認められた場合は、フィッシャーの直接確率法を用いて溶媒対照群と各用量群との間の有意差検定(有意水準は多重性を考慮して、5%または1%を処理群の数で割ったものを用いた)を行った。その結果、溶媒対照群と比較して、被験物質による染色体異常細胞の出現頻度が2用量以上で有意に増加し、かつ用量依存性あるいは再現性が認められた場合を陽性とした。</p>
結果	
細胞毒性	
代謝活性ありの場合	短時間処理法の場合は、125~250 μ g/mL
代謝活性なしの場合	短時間処理法の場合は、125~250 μ g/mL 連続処理法の場合は、125 μ g/mL
染色体異常	
代謝活性ありの場合	試験した全ての用量で染色体異常誘発性は認められなかった。
代謝活性なしの場合	試験した全ての用量で染色体異常誘発性は認められなかった。
注釈	特記事項なし
結論	
染色体異常	陰性
注釈	(財)畜産生物科学安全研究所
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS(SIAM16)、化学物質毒性試験報告書Vol9(2002)
引用文献(元文献)	文献1、文献12、文献16
備考	

試験物質名	混合物 (Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltを約80%含むfatty acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt)
CAS番号	4016-24-4
純度等	混合物として、64.5%
注釈	炭素鎖長の異なる脂肪酸2-スルホ、1-メチルエステルのナトリウム塩を不純物として含む
方法	
方法／ガイドライン	OECD473
GLP適合	いいえ
試験を行った年	1998
細胞株	選択してください Chinese Hamster Lung(CHL)
代謝活性化(S9)の有無	有
試験条件	<用量>代謝活性化法(S9-あるいは+): 0.05~0.25mg/mL(公差0.05で5段階) 連続処理法(S9-, 24時間連続処理): 0.05~0.15mg/mL(公差0.025で5段階) 連続処理法(S9-, 48時間連続処理): 0.025~0.125mg/mL(公差0.025で5段階) <溶媒>生理食塩液 <陽性対照>Mitomycin C協和醗酵工業(株)、Benzo(a)pyrene 和光純薬工業(株)
結果	
細胞毒性	
代謝活性ありの場合	0.25mg/mL
代謝活性なしの場合	24時間処理: 0.13mg/mL 48時間処理: 0.11mg/mL
染色体異常	
代謝活性ありの場合	試験した全ての用量で染色体異常誘発性は認められなかった。
代謝活性なしの場合	試験した全ての用量で染色体異常誘発性は認められなかった。
注釈	特記事項なし
結論	
染色体異常	陰性
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター
信頼性	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、非GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ
引用文献(元文献)	文献1
備考	

5-7 *in vivo* 遺伝毒性
GENETIC TOXICITY IN VIVO

5-8 発がん性
CARCINOGENICITY

5-9 生殖・発生毒性(受胎能と発生毒性を含む)
REPRODUCTIVE TOXICITY(Including Fertility and Development Toxicity)

A. 受胎能
FERTILITY

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	純度: 96.6w/v%, Lot:000203、
注釈	α -スルホミリスチン酸二ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	
方法／ガイドライン	OECD422
試験のタイプ	その他
GLP適合	はい
試験を行った年	2002
試験系(種／系統)	Rat Crj: CD(SD)IGS
性別(雄:M、雌:F)	MF
投与量	0, 5, 20, 80, 300 mg/kg
各用量群(性別)の動物数	10
溶媒(担体)	オリーブオイル
投与経路	強制経口投与
試験期間	雄: 48日、雌: 交配前14日～授乳5日目まで
交配前暴露期間	14日
試験条件	10週齢で試験に使用 投与液量: 5mL/kg 投与は、テフロン製胃ゾンデを装着した注射筒を用いて1日1回、交配開始14日前から雄は47日間、雌は分娩後の哺育4日(42~45日間)まで、経口投与した。

統計学的処理	パラメトリックデータは、Bartlettの分散検定を行い、分散が一樣な場合は一元配置の分散分析を行った。分散が一樣でない場合およびノンパラメトリックデータは、Kruskal-Wallisの順位検定を行った。それらの結果、有意差を認めた場合、Dunnett法またはScheffe法(群の大きさが異なる場合)により対照群に対する各群の比較検定を行った。カテゴリカルデータは、生殖発生毒性に関するパラメーターは、 χ^2 検定を、病理学的検査における異常例の出現率にはFisherの直接確率法を用いた、なお、新生児に関するデータは、1腹当たりの平均を1標本とした。																								
結果																									
体重、体重増加量	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																								
摂餌量、飲水量	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																								
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	軽度な軟便が、投与11日から15日にかけて、80mg/kg群で雌雄の各1匹、300mg/kg群で雌雄の各3匹に認められた。80、300mg/kgの数例に一過性の軟便を認める。 アニオン系界面活性剤のラットへの経口投与により、下痢の発現することが知られている。本試験においても、80および300 mg/kg群の雌雄の一部の例に、軟便が認められたが、一過性の軽度な変化で、腸には病理組織学的変化は認められず、体重にも変化が認められなかった。したがって、本試験で認められた軟便は、有害性の観点からは、ほとんど問題にならない変化と判断されると試験責任者は考察している。																								
妊娠率(妊娠個体数/交配数)	交尾は20 mg/kg群の1対を除いて全例に成立した。受胎率も、対照群は精子形成異常の認められた雄3匹の対で受胎しなかったため、受胎率が70 %であったが、被験物質投与の各群では100 %であった。																								
交尾前期間(交配までの日数及び交配までの性周期回数)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																								
妊娠期間(妊娠0日から起算)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																								
妊娠指数(生存胎仔数/着床痕数)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。 対照群は精子形成異常の認められた雄3匹の対で受胎しなかったため、受胎率が70 %であったが、被験物質投与の各群では100 %であった。																								
哺乳所見	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。 300 mg/kg群の1匹が難産で、分娩予定日の夕方に陰出血が認められたが分娩は認められず、翌朝になって14匹の出産児が確認され、分娩は完了した。この例では、出産児のうち12匹は死亡しており、2匹の新生児に対しても雌親は哺育行動をとらず、1匹は哺育0日に死亡し、他の1匹も哺育2日の朝に存在が確認できず、捕食されたものと判断された。この1例を除いて、分娩および哺育状態に異常は認められなかった。																								
性周期変動	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																								
精子所見	対照群に認められた妊娠不成立の3対では、雄の3匹に共通して、精巣の間質細胞の軽度な過形成を伴った中等度ないし重度な精細管萎縮、および精巣上体の精巣上体管内精子の中等度ないし重度な減少が認められた。20 mg/kg群で認められた交配不成立の1対では、雌雄の生殖器系器官および雌の下垂体に変化は認められなかった。																								
血液学的所見(発生率、重篤度)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																								
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	雄の300mg/kg群において、有意なGPTの高値およびトリグリセライドの低値をみとめた <table><tr><td>投与量(mg/kg)</td><td>0</td><td>5</td><td>20</td><td>80</td><td>300</td></tr><tr><td>動物数</td><td>10</td><td>10</td><td>9</td><td>10</td><td>10</td></tr><tr><td>GPT</td><td>41±4</td><td>40±6</td><td>38±3</td><td>44±6</td><td>53±7**</td></tr><tr><td>トリグリセライド</td><td>63±28</td><td>43±18</td><td>50±22</td><td>49±18</td><td>29±13*</td></tr></table> *: p<0.05、**: p<0.01 雌: 統計学的有意差なし GPTの増加については、軽度な変化であったが本系ラットの背景データにおける正常範囲をやや上回る異常値であり、また投与量設定試験においても同様の変化が認められていることから、被験物質の投与に起因する変化と判断される。しかしながら、肝臓には病理組織学的変化は認められず、他に関連する変化も認められなかった。 一方、トリグリセライドの変化については、本被験物質の界面活性剤としての性質と関連して、脂質の吸収に影響する可能性が考えられるものの、変化は背景データにおける正常範囲内のごく軽度なもので、毒性学的意義は小さいものと考えられると試験責任者は考察している。	投与量(mg/kg)	0	5	20	80	300	動物数	10	10	9	10	10	GPT	41±4	40±6	38±3	44±6	53±7**	トリグリセライド	63±28	43±18	50±22	49±18	29±13*
投与量(mg/kg)	0	5	20	80	300																				
動物数	10	10	9	10	10																				
GPT	41±4	40±6	38±3	44±6	53±7**																				
トリグリセライド	63±28	43±18	50±22	49±18	29±13*																				
尿検査所見(発生率、重篤度)	統計学的有意差無し																								
死亡数(率)、死亡時間	20mg/kg群で、雄の1匹が投与過誤により死亡した。 300 mg/kg群の1匹が難産で、分娩予定日の夕方に陰出血が認められたが分娩は認められず、翌朝になって14匹の出産児が確認され、分娩は完了した。この例では、出産児のうち12匹は死亡していた。																								

剖検所見(発生率、重篤度)	前胃粘膜の肥厚を、80mg/kgの雄6/10および雌10/10、300mg/kgの雄10/10および雌9/9例に認める 一般に、アニオン系界面活性剤は他の界面活性剤と同様に局所刺激性を有し、本被験物質についても、ラットへの反復経皮投与により、局所刺激性反応が認められている。したがって、本試験で認められた前胃の変化は、局所的な障害による炎症および上皮の反応性増殖と解せられると試験責任者は考察している。
着床数	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
黄体数	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
未熟卵胞数	検索せず
臓器重量	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	80、300mg/kg処置群の雌雄に扁平上皮過形成、潰瘍、粘膜下組織および粘膜あるいはその両方の浮腫と炎症細胞浸潤 用量(mg/kg) 雄(n=5) 0 5 20 80 300 前胃扁平上皮過形成 - 5 5 5 1 0 +,+,+ 0 0 0 4* 5** 浮腫 - 5 5 5 5 2 +,+ 0 0 0 0 3 粘膜下の浮腫 - 5 5 5 2 1 +,+ 0 0 0 3 4* 粘膜下への炎症細胞浸潤 - 5 5 5 5 1 +,+ 0 0 0 0 4* 雌(n=5) 0 5 20 80 300 前胃扁平上皮過形成 - 5 5 5 1 0 +,+ 0 0 0 4* 5** 潰瘍 - 5 5 5 5 4 ++ 0 0 0 0 1 粘膜下浮腫 - 5 5 5 3 0 +,+ 0 0 0 2 5** 粘膜下への炎症細胞浸潤 - 5 5 5 4 3 + 0 0 0 1 2 Note:-, Not detected; +,slight; ++,moderate;**,severer NOEL設定根拠
実際に摂取された量	0, 5, 20, 80, 300 mg/kg
用量反応性	あり
同腹仔数及び体重	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
性比	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
離乳までの分娩後生存率	検索せず
新生仔所見(肉眼的な異常)	外表および内臓異常は、いずれの児動物にも認められなかった。内臓変異についても、胸腺の頸部遺残、左臍動脈遺残、および腎盂の拡張が少数例に認められたが、被験物質の投与に起因する変化は認められなかった。
生後発育及び発育率	検索せず
膣開口又は精巣下降(包皮分離)	検索せず
生殖器-肛門間距離などその他の観察事項	検索せず
臓器重量	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
統計的結果	
注釈	
結論	
Pに対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	NOEL:300mg/kg
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	NOEL:300mg/kg
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	検索せず
注釈	(財)畜産生物科学安全研究所
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS(SIAM16)、化学物質毒性試験報告書VoI9(2002)
引用文献(元文献)	文献1、文献12、文献14
備考	

B. 発生毒性
DEVELOPMENTAL TOXICITY

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	純度: 96.6w/v%, Lot:000203、
注釈	α -スルホミリスチン酸二ナトリウム0.5%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.3%(w/w)、パルミチン酸メチル0.1%(w/w)、水2.2%(w/w)
方法	
方法／ガイドライン	OECD422
GLP適合	はい
試験を行った年	2002
試験系(種／系統)	Rat
	Crj: CD(SD)IGS
性別(雄:M、雌:F)	MF
投与量	0, 5, 20, 80, 300 mg/kg
各用量群(性別)の動物数	10
投与経路	強制経口投与
試験期間	雄: 48日、雌: 交配前14日～授乳5日目まで
交配前暴露期間	14日
試験条件	10週齢で試験に使用 投与液量: 5mL/kg 投与は、テフロン製胃ゾンデを装着した注射筒を用いて1日1回、交配開始14日前から雄は47日間、雌は分娩後の哺育4日(42～45日間)まで、経口投与した。
統計学的処理	パラメトリックデータは、Bartlettの分散検定を行い、分散が一樣な場合は一元配置の分散分析を行った。分散が一樣でない場合およびノンパラメトリックデータは、Kruskal-Wallisの順位検定を行った。それらの結果、有意差を認めた場合、Dunnett法またはScheffe法(群の大きさが異なる場合)により対照群に対する各群の比較検定を行った。カテゴリカルデータは、生殖発生毒性に関するパラメーターは、 χ^2 検定を、病理学的検査における異常例の出現率にはFisherの直接確率法を用いた、なお、新生児に関するデータは、1腹当たりの平均を1標本とした。
結果	
死亡数(率)、死亡時間	20mg/kg群で、雄の1匹が投与過誤により死亡した。 300 mg/kg群の1匹が難産で、分娩予定日の夕方に膣出血が認められたが分娩は認められず、翌朝になって14匹の出産児が確認され、分娩は完了した。この例では、出産児のうち12匹は死亡していた。
用量あたり妊娠数	交尾は20 mg/kg群の1対を除いて全例に成立した。受胎率も、対照群は精子形成異常の認められた雄3匹の対で受胎しなかったため、受胎率が70 %であったが、被験物質投与の各群では100 %であった。 用量(mg/kg) 0 5 20 80 300 受胎指数 0.7 1 1 1 1
流産数	300 mg/kg群の1匹が難産で、分娩予定日の夕方に膣出血が認められたが分娩は認められず、翌朝になって14匹の出産児が確認され、分娩は完了した。この例では、出産児のうち12匹は死亡していた。
早期/後期吸収数	検索せず
着床数	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
黄体数	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
妊娠期間(妊娠0日から起算)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
体重、体重増加量	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
摂餌量、飲水量	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	軽度な軟便が、投与11日から15日にかけて、80mg/kg群で雌雄の各1匹、300mg/kg群で雌雄の各3匹に認められた。80、300mg/kgの数例に一過性の軟便を認める。 アニオン系界面活性剤のラットへの経口投与により、下痢の発現することが知られている。本試験においても、80および300 mg/kg群の雌雄の一部の例に、軟便が認められたが、一過性の軽度な変化で、腸には病理組織学的変化は認められず、体重にも変化が認められなかった。したがって、本試験で認められた軟便は、有害性の観点からは、ほとんど問題にならない変化と判断されると試験責任者は考察している。
血液学的所見(発生率、重篤度)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。

	<p>雄の300mg/kg群において、有意なGPTの高値およびトリグリセライドの低値をみとめた</p> <table><tr><td>投与量(mg/kg)</td><td>0</td><td>5</td><td>20</td><td>80</td><td>300</td></tr><tr><td>動物数</td><td>10</td><td>10</td><td>9</td><td>10</td><td>10</td></tr><tr><td>GPT</td><td>41±4</td><td>40±6</td><td>38±3</td><td>44±6</td><td>53±7**</td></tr><tr><td>トリグリセライド</td><td>63±28</td><td>43±18</td><td>50±22</td><td>49±18</td><td>29±13*</td></tr></table> <p>*:p<0.05、**:p<0.01</p>	投与量(mg/kg)	0	5	20	80	300	動物数	10	10	9	10	10	GPT	41±4	40±6	38±3	44±6	53±7**	トリグリセライド	63±28	43±18	50±22	49±18	29±13*																																																																														
投与量(mg/kg)	0	5	20	80	300																																																																																																		
動物数	10	10	9	10	10																																																																																																		
GPT	41±4	40±6	38±3	44±6	53±7**																																																																																																		
トリグリセライド	63±28	43±18	50±22	49±18	29±13*																																																																																																		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	<p>雌:統計学的有意差なし</p> <p>GPTの増加については、軽度な変化であったが本系ラットの背景データにおける正常範囲をやや上回る異常値であり、また投与量設定試験においても同様の変化が認められていることから、被験物質の投与に起因する変化と判断される。しかしながら、肝臓には病理組織学的変化は認められず、他に関連する変化も認められなかった。</p> <p>一方、トリグリセライドの変化については、本被験物質の界面活性剤としての性質と関連して、脂質の吸収に影響する可能性が考えられるものの、変化は背景データにおける正常範囲内のごく軽度なもので、毒性学的意義は小さいものと考えられると試験責任者は考察している。</p>																																																																																																						
剖検所見(発生率、重篤度)	<p>前胃粘膜の肥厚を、80mg/kgの雄6/10および雌10/10、300mg/kgの雄10/10および雌9/9例に認める</p> <p>一般に、アニオン系界面活性剤は他の界面活性剤と同様に局所刺激性を有し、本被験物質についても、ラットへの反復経皮投与により、局所刺激性反応が認められている。したがって、本試験で認められた前胃の変化は、局所的な障害による炎症および上皮の反応性増殖と解せられると試験責任者は考察している。</p>																																																																																																						
臓器重量(総子宮量への影響)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																																																																																																						
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	<p>80、300mg/kg処置群の雌雄に扁平上皮過形成、潰瘍、粘膜下組織および粘膜あるいはその両方の浮腫と炎症細胞浸潤</p> <table><tr><td>用量(mg/kg bw/day)</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>雄(n=5)</td><td>0</td><td>5</td><td>20</td><td>80</td><td>300</td></tr><tr><td>前胃扁平上皮過形成</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>-</td><td></td><td>5</td><td>5</td><td>5</td><td>1</td></tr><tr><td>0</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>0</td></tr><tr><td>+,++,+++</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>4*</td><td>5**</td></tr><tr><td>浮腫</td><td></td><td>5</td><td>5</td><td>5</td><td>5</td></tr><tr><td>-</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>2</td></tr><tr><td>+,++</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>3</td></tr><tr><td>粘膜下の浮腫</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>-</td><td></td><td>5</td><td>5</td><td>5</td><td>2</td></tr><tr><td>0</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>1</td></tr><tr><td>+,++</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>3</td><td>4*</td></tr><tr><td>粘膜下への炎症細胞浸潤</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>-</td><td></td><td>5</td><td>5</td><td>5</td><td>5</td></tr><tr><td>0</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>1</td></tr><tr><td>+,++</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>4*</td></tr></table> <p>雌(n=5) 0 5 20 80 300</p> <p>前胃扁平上皮過形成</p> <p>- 5 5 5 1 0</p> <p>+,++ 0 0 0 4* 5**</p> <p>潰瘍 - 5 5 5 5 4</p> <p>++ 0 0 0 0 1</p> <p>粘膜下浮腫</p> <p>- 5 5 5 3 0</p> <p>+,++ 0 0 0 2 5**</p> <p>粘膜下への炎症細胞浸潤</p> <p>- 5 5 5 4 3</p> <p>+ 0 0 0 1 2</p> <p>Note:-, Not detected; +,slight; ++,moderate;***,severer</p> <p>NOEL設定根拠</p>	用量(mg/kg bw/day)						雄(n=5)	0	5	20	80	300	前胃扁平上皮過形成						-		5	5	5	1	0					0	+,++,+++	0	0	0	4*	5**	浮腫		5	5	5	5	-					2	+,++	0	0	0	0	3	粘膜下の浮腫						-		5	5	5	2	0					1	+,++	0	0	0	3	4*	粘膜下への炎症細胞浸潤						-		5	5	5	5	0					1	+,++	0	0	0	0	4*
用量(mg/kg bw/day)																																																																																																							
雄(n=5)	0	5	20	80	300																																																																																																		
前胃扁平上皮過形成																																																																																																							
-		5	5	5	1																																																																																																		
0					0																																																																																																		
+,++,+++	0	0	0	4*	5**																																																																																																		
浮腫		5	5	5	5																																																																																																		
-					2																																																																																																		
+,++	0	0	0	0	3																																																																																																		
粘膜下の浮腫																																																																																																							
-		5	5	5	2																																																																																																		
0					1																																																																																																		
+,++	0	0	0	3	4*																																																																																																		
粘膜下への炎症細胞浸潤																																																																																																							
-		5	5	5	5																																																																																																		
0					1																																																																																																		
+,++	0	0	0	0	4*																																																																																																		
同腹仔数及び体重	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																																																																																																						
生存数(生存胎仔数及び胎仔数)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																																																																																																						
性比	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																																																																																																						
生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																																																																																																						
生後発育	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																																																																																																						
分娩後生存率	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。																																																																																																						
肉眼的異常(外表観察、内臓標本、骨格標本)	外表および内臓異常は、いずれの児動物にも認められなかった。内臓変異についても、胸腺の頸部遺残、左臍動脈遺残、および腎盂の拡張が少数例に認められたが、被験物質の投与に起因する変化は認められなかった																																																																																																						
実際に投与された量	0, 5, 20, 80, 300																																																																																																						
用量反応性	あり																																																																																																						
統計的結果																																																																																																							
注釈																																																																																																							

結論	
PIに対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	NOEL:300mg/kg
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	NOEL:300mg/kg
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	検索せず
注釈	(財)畜産生物科学安全研究所
信頼性	1 制限なく信頼性あり
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに基づき、GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS(SIAM16)、化学物質毒性試験報告書Vol9(2002)
引用文献(元文献)	文献1、文献12、文献14
備考	

試験物質名	混合物 (Decanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt:Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt:Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt=10:20:70)
CAS番号	4016-24-4
純度等	混合物として、70.3%
注釈	Tetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt:約14% Decanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt:約7.0%
方法	
方法／ガイドライン	医薬品毒性試験法ガイドライン
GLP適合	いいえ
試験を行った年	1990
試験系(種／系統)	Rat Crj: CD(SD)IGS
性別(雄:M、雌:F)	F
投与量	0、2.1、7.1、21.4%
各用量群(性別)の動物数	対照群および2.1%群:27、7.1%および21.4%群:28
投与経路	経皮
試験期間	雌:妊娠7日～17日まで
交配前暴露期間	0
試験条件	雄は10週齢、雌は9週齢の動物を試験に用いた。未経産の雌を雄と終夜同居させることにより交配させ、翌朝膣垢中に精子を確認した雌動物を体重順に各群に振り分け、同一日に交尾した雌動物が群間で均等になるように割り付けた。なお、妊娠日の起算は精子確認日を妊娠0日とした。 投与は1日1回行い、1mLのディスポーザル注射筒に投与検体液を採り、0.2mL/匹/日の割合で背部投与部位の皮膚(3×4cm)に均一に塗布した。 投与期間は、雌動物に1日1回として妊娠7日～17日まで11日間連日行った。
統計学的処理	Bartlettテストによって1%有意水準で等分散性を確認した。等分散の場合には、Dunnettテストにより媒体対照群と各被験物質投与群との多重比較を行い、等分散が認められなかった場合には、これが外れ値に起因するものかを確認した。外れ値を統計学的解析から除外する場合には、これを棄却して再度等分散性を確認した後、Dunnettテストにより媒体対照群と各被験物質投与群との多重比較を行った。なお、外れ値が除外できない場合は、そのままDunnettテストにより媒体対照群と各被験物質投与群との多重比較を行った。 胎児の異常と変異の出現率、着床率、胚・胎児の死亡率については、Steelテストにより媒体対照群と各被験物質群との多重比較を行った。性比については、 χ^2 検定を行った。なお、胎児に関する項目は1腹を標本単位とした。
結果	
死亡数(率)、死亡時間	いずれの群においても死亡例は認めなかった。
用量あたり妊娠数	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
流産数	
早期/後期吸収数	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
着床数	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
黄体数	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
妊娠期間(妊娠0日から起算)	
体重、体重増加量	統計学的意差なし
摂餌量、飲水量	摂餌量に、統計学的意差なし。飲水量は検索せず。
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	妊娠期間中に特記すべき一般毒性症状の変化は観察されなかった。検体投与期間中、投与部位の背部皮膚に、被験物質の一次刺激性による皮膚反応が中用量群(7.1w/v%)および高用量群(21.4w/v%)に認められた。
血液学的所見(発生率、重篤度)	検索せず
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	検索せず
剖検所見(発生率、重篤度)	被験物質投与による影響は認められなかった。
臓器重量(総子宮量への影響)	検索せず
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	検索せず
同腹仔数及び体重	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。

生存数(生存胎仔数及び胎仔数)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
性比	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)	
生後発育	
分娩後生存率	
肉眼的異常(外表観察、内臓標本、骨格標本)	試験群は、対照群と比較すると統計学的に意差は異常は認められなかった。
実際に投与された量	不明
用量反応性	あり
統計的結果	
注釈	
結論	
Pに対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	NOAEL:21.4%(w/v)
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	NOAEL:21.4%(w/v)
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	
注釈	ライオン株式会社、安全性評価センター
信頼性	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	医薬品毒性試験法ガイドラインに基づき、非GLP条件下で試験が実施されている。
出典	OECD SIDS(SIAM16)、社内データ
引用文献(元文献)	文献1
備考	

5-10その他関連情報

OTHER RELEVANT INFORMATION

5-11 ヒト暴露の経験

EXPEIENCE WITH HUMAN EXPOSURE

試験物質名	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4016-24-4
純度等	
注釈	
製造／加工／使用情報	衣料用洗剤として使用
研究デザイン	
仮説検証	
データ収集方法	
被験者の説明	一般消費者等
暴露期間	常時
測定又は評価曝露データ	
結果	
統計的結果	
発病頻度	
相関	
分布	
研究提供者等	
注釈	
結論	
結論	
注釈	
信頼性	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	社内データ
引用文献(元文献)	
備考	

6 参考文献(以下に欄を追加の上、一文献について一行にて一覧を記載)

文献番号(半角数字: 自動的に半角になります)	詳 細(OECD方式での記入をお願いします。下の記入例参照。)	日本語の場合、以下の欄にお願いします。
1	UNEP PUBLICATIONS (2003) SIDS Initial Assessment Report For SIAM 16, 27-30	
2		化学物質評価研究機構、2-スルホヘキサデカン酸-1-メチルエステルナトリウム塩(被験物質番号 K-1515)の物理化学性状の測定、試験番号:81515K、2000
3	Fujiwara M, Miyake M, Abe Y (1993) Colloidal properties of α -sulfonated fatty acid methyl esters and their applicability in hard water, Coll Polym Sci, 271(8), 780-785	
4	Miura K (2007) Aquatic Risk Assessment of 2-Sulfonato Fatty Acid Methyl Ester Sodium Salt(MES), J Oleo Sci, 56(3), 123-128	
5		化学物質評価研究機構、2-スルホヘキサデカン酸-1-メチルエステルナトリウム塩(被験物質番号 K-1515)の微生物による分解度試験、試験番号:21515、2000
6	Masuda M, Odake H, Miura K and Ohba K (1993) Biodegradation of 2-Sulfonated fatty Acid Methyl Ester(α -SFMe), J Jpn. Oil Chem. Soc.(YUKAGAKU), 42(9), 643-648	
7	Takei T, Odake H, Miura K, and Takagi Y (2006) Ecotoxicity of Tetradecanoic Acid, 2-sulfo-, 1-methylester, Sodium Salt (C14MES), J Oleo Sci, 55(3), 121-126	
8		株式会社東レリサーチセンター、試験報告書「パルミチン酸2-スルホ-,1-メチルエステルナトリウム塩のヒメダカ(<i>Oryzias latipes</i>)に対する急性毒性試験」、試験番号:NMMP/E00/4080、2001
9		株式会社東レリサーチセンター、試験報告書「パルミチン酸2-スルホ-,1-メチルエステルナトリウム塩のオオミジンコ(<i>Daphnia magna</i>)に対する急性遊泳阻害試験」、試験番号:NMMP/E00/2080、2001
10		株式会社東レリサーチセンター、試験報告書「パルミチン酸2-スルホ-,1-メチルエステルナトリウム塩の藻類(<i>Selenastrum capricornutum</i>)に対する生長阻害試験」、試験番号:NMMP/E00/1080、2001
11		株式会社東レリサーチセンター、試験報告書「パルミチン酸2-スルホ-,1-メチルエステルナトリウム塩のオオミジンコ(<i>Daphnia magna</i>)に対する繁殖阻害試験」、試験番号:NMMP/E00/3080
12		化学物質点検推進連絡協議会、化学物質毒性試験報告書 Vol9、厚生労働省医薬局審査管理課化学物質安全対策室監修、2002
13		(財)畜産生物科学安全研究所、1-メトキシカルボニルペンタデカンスルホン酸ナトリウムのラットを用いる経口投与による急性毒性試験、試験番号:99-172
14		(財)畜産生物科学安全研究所、1-メトキシカルボニルペンタデカンスルホン酸ナトリウムのラットを用いる反復経口投与毒性・生殖発生毒性併合試験、試験番号:99-173
15		(財)畜産生物科学安全研究所、1-メトキシカルボニルペンタデカンスルホン酸ナトリウムの細菌を用いる復帰突然変異試験、試験番号:99-174
16		(財)畜産生物科学安全研究所、1-メトキシカルボニルペンタデカンスルホン酸ナトリウムのほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験、試験番号:99-175
17		
18		
19		
20		
21		
22		
23		

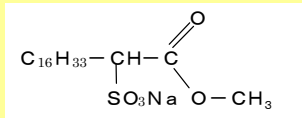
項目名 (同一の試験項目について複数の試験がある場合、当該項目行をコピー追加してください。)	データ入力欄
	黄色＝必須項目
	青＝任意項目
	紫＝一部の物質で必須項目

1. 一般情報

GENERAL INFOMATION

1.01 物質情報

SUBSTANCE INFOMATION

CAS番号	4062-78-6
物質名(日本語名)	オクタデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩
物質名(英名)	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
別名等	
国内適用法令の番号	2-3065
国内適用法令物質名	スルホ天然油脂脂肪酸メチルのナトリウム塩
OECD/HPV名称	
分子式	C ₁₉ H ₃₇ NaO ₅ S
構造式	
備考	

1.02 安全性情報収集計画書／報告書作成者に関する情報

SPONSOR INFOMATION

機関名	ライオン株式会社
報告書作成日	2009年3月6日
備考	

1.1 一般的な物質情報

GENERAL SUBSTANCE INFOMATION

物質のタイプ	有機化合物
物質の色・におい・形状等の情報	
物理的状態(20℃、1013hPa)	固体
純度(重量／重量%)	
出典	社内データ
備考	

1.2 不純物

IMPURITIES

CAS番号	4016-24-4
物質名称(IUPAC)	Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methylester, sodium salt
国内適用法令の番号	2-3065
適用法令における名称	スルホ天然油脂脂肪酸メチルのナトリウム塩
含有率(%)	70 - 90 % w/w
出典	社内データ
備考	現在日本国内では製造されていない

1.3 添加物

ADDITIVES

CAS番号	
物質名称(IUPAC)	
国内適用法令の番号	
適用法令における名称	
含有率(%)	なし
出典	社内データ
備考	

1.4 別名

SYNONYMS

物質名-1	2-Sulfo-octadecanoic acid 1-methyl ester sodium salt
物質名-2	
出典	
備考	

1.5 製造・輸入量

QUANTITY

製造・輸入量	0
報告年	2007
出典	社内データ
備考	現在日本国内では製造されていない

1.6 用途情報

USE PATTERN

主な用途情報	選択してください
工業的用途	選択してください
用途分類	9クリーニング/洗剤と添加物－173洗剤
出典	社内データ
備考	現在日本国内では製造されていない

1.7 環境および人への暴露情報

SOURCES OF EXPOSURE

暴露に関する情報	
出典	社内データ
備考	現在日本国内では製造されていない

1.8 追加情報

ADDITIONAL INFORMATION

既存分類	
職業暴露限界	
廃棄方法	
文献調査の範囲と日付	Beilstein、Caplus、Toxline、Medline、HSDB、Chemfinder、(以下レビュー)IUCLID、NITE CHRIP、文献調査の日付:2005年9月12日～2007年11月30日
出典	
備考	

2. 物理化学的性状

PHYSICAL CHEMICAL DATA

2.0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	別添資料を参照
-------------	---------

2.1 融点

MELTING POINT

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	76%
注釈	不明
方法	不明
GLP	いいえ
試験を行った年	不明
試験条件	不明
結果	
融点: °C	179.8-180.0
分解: °C	いいえ
昇華: °C	いいえ
結論	179.8-180.0
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	キースタディ ピアレビューされた学術論文であり、下記OECDガイドラインに従って実施した試験結果と概ね一致する。
出典	
引用文献	文献1
備考	

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	98.7%(HPLC)、製造者名:ライオン株式会社、Lot番号:060906-1
注釈	α-スルホステアリン酸ナトリウム0.57%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.05%(w/w)、硫酸ナトリウム0.01%(w/w)、ステアリン酸メチル0.4%(w/w)、水分0.26%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 102 "融点/融点範囲(毛管法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2006

試験条件	検体約1gを乳鉢にてすりつぶし、毛細管(Melting Point Tubes(Mettler社製:ME-18552)に約3mmになるように詰めて測定。 測定機器:精密微量融点測定器(株式会社 石井商店製) 温度範囲:69.0~166.6℃ 昇温速度:1℃/1~2分 試験連数:1 70℃に温めたシリコンオイル中に毛細管を挿入し、サンプルが完全に融解し、固体を認めなくなった時の温度を融点とした。
結果	
融点: °C	160.8-166.6
分解: °C	いいえ
昇華: °C	いいえ
結論	160.8-166.6
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	
備考	

2.2 沸点 BOILING POINT

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	98.0%以上(HPLC)、製造者名:ライオン株式会社、Lot番号:060906-1
注釈	α-スルホステアリン酸二ナトリウム0.57%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.05%(w/w)、硫酸ナトリウム0.01%(w/w)、ステアリン酸メチル0.4%(w/w)、水分0.26%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 103 "沸点(示差走査熱量分析法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2006
試験条件	約5mgのサンプルをDTAパンに精密に量り取り、5℃/分の昇温速度で常温~350℃の範囲で測定。 測定機器 ・MAC SCIENCE TG-DTA Model2000S ・アルミ浅皿(50μL、φ 5.2mm × h2.6mm)
結果	
沸点: °C	
圧力	
分解: °C	はい
結論	約290℃で分解
注釈	TG曲線から約290℃付近から急激な重量減少が起こり、この減少に伴い褐変が起こることを確認。また、DTA曲線からは、この温度の前後で多様な分解に伴う複数の吸熱ピークが観測された。よって、TGが急に減少し始める温度を分解温度とした。
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	
備考	

2.3 密度(比重) DENSITY(RELATIVE DENSITY)

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	98.0%以上(HPLC)、製造者名:ライオン株式会社、Lot番号:060906-1
注釈	α-スルホステアリン酸二ナトリウム0.57%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.05%(w/w)、硫酸ナトリウム0.01%(w/w)、ステアリン酸メチル0.4%(w/w)、水分0.26%(w/w)
方法	JIS K7112(1999)、5.2B法(5.2ピクノメーター法)
GLP	いいえ
試験を行った年	2006
試験条件	恒温水槽:クールニックス:CL-150F COOLNIT(TAITEC社製) 50mLピクノメーターを用いて、25℃恒温水槽にて測定
結果	1.482g/cm ³
タイプ	密度
温度(℃)	25℃
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり キースタディ

信頼性の判断根拠	JIS法に従って実施した非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	
備考	

2.4 蒸気圧

VAPOUR PRESSURE

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	MPBPWIN(v1.41)
GLP	
試験を行った年	2005
試験条件	
結果	
蒸気圧	9.04E-16 hPa
温度: °C	25
分解: °C	その他: 下欄のセルに記載
結論	9.04E-16 hPa
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	キースタディ
出典	一般的に認められている計算方法及びカテゴリとしての評価
引用文献	社内データ
備考	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltは、約290°Cで分解して沸点は持たず、融点が160.8~166.6°Cであることから、実質的に蒸気圧を有しないと考えられる。これは、Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltのカテゴリ物質であり、融点および沸点が同等であるTetradecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS: 4016-22-2) およびHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS: 4016-24-4) についても同様と考えられる。本カテゴリ物質の中では、OECD SIDS (SIAM16)において、Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltの100°Cに於ける蒸気圧がOECD TG104に従って唯一実測されているが、その結果は<0.00017hPaであり、実質的な蒸気圧を有していない。このことから、Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltも融点以下の温度では実質的に蒸気圧を有さず、実測値からの推定による100°Cに於ける蒸気圧は、<0.00017hPa程度と考えられる。

2.5 分配係数(log Kow)

PARTITION COEFFICIENT

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	KOWWIN v1.67
GLP	
試験を行った年	2005
試験条件	
結果	
Log Kow	5.05
温度: °C	
結論	5.05
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
信頼性の判断根拠	キースタディ
出典	一般的に認められている計算方法
引用文献	社内データ
備考	本物質はスルホン酸塩であり、水中では完全に解離している。また、バッファーを用いたとしても解離を抑制することはできず、非解離状態の分配係数を実測することはできない。よって、計算値を用いた。

2.6.1 水溶解性(解離定数を含む)

WATER SOLUBILITY & DISSOCIATION CONSTANT

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	不明
注釈	¹ H-NMRスペクトルで不純物に関するピークは検出されなかった
方法	
GLP	不明
試験を行った年	1993

試験条件	25mLチューブに各濃度の被験物質液を調製し、-20℃で一晩放置した後、ウォーターバスインキューベーターにて加温し、結晶の有無を肉眼で判定し、完全に溶解した最高濃度を各温度における溶解度として算出
結果	
水溶解度	0.18mM
温度: °C	33
pH	不明
pH測定時の物質濃度	
結論	72mg/L
注釈	分子量400から換算
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	選択してください
信頼性の判断根拠	非GLP試験であるが、ピアレビューされた学術論文であり、科学的に評価可能
出典	社内データ
引用文献	文献2
備考	本物質が水中でミセルを形成することから、臨界ミセル濃度(CMC)を水溶解性として記載。
解離定数	
試験物質	
同一性	
方法	
温度: °C	
GLP	
試験条件	
試験を行った年	
結果	
結論	強酸であるスルホン酸のナトリウム塩であるため、水中では完全に解離する
注釈	
信頼性スコア	選択してください
	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献	
備考	

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	98.0%以上 (HPLC)、製造者名:ライオン株式会社、Lot番号:060906-1
注釈	α -スルホステアリン酸ナトリウム0.57%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.05%(w/w)、硫酸ナトリウム0.01%(w/w)、ステアリン酸メチル0.4%(w/w)、水分0.26%(w/w)
方法	OECD Test Guideline 105 "水への溶解性(フラスコ法)"
GLP	いいえ
試験を行った年	2006
試験条件	恒温水槽:クールニックス:EYELA NTS-4000(東京理科器械社製) 被験物質約0.01gを量り取り、全量で約25gになるように水を加えた。これを25℃で1、2および3日間攪拌した。Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt水溶液を0.45 μ mのクロマトディスクで濾過し、濾液中の被験物質をHPLCで測定し、検量線から濃度を算出した。
結果	
水溶解度	0.0454 g/L (1日後) 0.0437 g/L (2日後) 0.0458 g/L (3日後)
温度: °C	25
pH	不明
pH測定時の物質濃度	
結論	0.0454g/L
注釈	測定結果は、1日後からほぼ一定であり、溶解平衡に達したと判断できるため、1日後の値を採用した。
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	
備考	
解離定数	
試験物質	
同一性	
方法	
温度: °C	
GLP	
試験条件	
試験を行った年	
結果	

結論	強酸であるスルホン酸のナトリウム塩であるため、水中では完全に解離する
注釈	
信頼性スコア	選択してください
	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献	
備考	

2.6.2 表面張力 SURFACE TENSION

2.7 引火点(液体) FLASH POINT(LIQUIDS)

2.8 自己燃焼性 (固体／気体) AUTO FLAMMABILITY(SOLIDS/GASES)

2.9 引火性 FLAMMABILITY

2.10 爆発性 EXPLOSIVE PROPERTIES

2.11 酸化性 OXIDISING PROPERTIES

2.12 酸化還元ポテンシャル OXIDATION/REDUCTION POTENTIAL

2.13 その他の物理化学的性状に関する情報 ADDITIONAL INFOMATION

3. 環境運命と経路 ENVIRONMENTAL FATE AND PATHWAYS

3.0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	別添資料を参照
-------------	---------

3.1 安定性 STABILITY

3.1.1. 光分解 PHOTODEGRADATION

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	AOPWIN v.1.92
タイプ	間接光分解
GLP	
試験を行った年	2007
光源と波長(nm)	
太陽光強度に基づいた相対強度	
物質のスペクトル	
試験条件	光照射時間:12時間/日
結果	
物質濃度	
温度(°C)	
直接光分解	
半減期t1/2	
分解度(%)と時間	
量子収率 (%)	
間接光分解	
増感剤(タイプ)	OHラジカル
増感剤濃度	1.5×10^{-6} OH/cm ³
速度定数	$22.0561E-12$ cm ³ /molecule·sec
半減期t1/2	t1/2=0.485日
分解生成物	不明
結論	t1/2=0.485日
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法

出典	社内データ
引用文献	
備考	

3.1.2. 水中安定性(加水分解性)

STABILITY IN WATER

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	
GLP	選択してください
試験を行った年	
試験条件	
結果	
設定濃度	
実測濃度	
所定時間後の分解度(%), pH, 温度	
半減期	
分解生成物	選択してください
結論	
注釈	
信頼性スコア	選択してください
	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献	文献3
備考	OECD SIDS (SIAM16)において、Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltのカテゴリー物質であるHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt (CAS: 4016-24-4) の水中安定性試験において、5日間は水中で安定であることが確認されている。Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltとHexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltは、炭素鎖長にC16とC18の違いがあるが、構造から判断してOctadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltの水中安定性は、Hexadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium saltと同様と判断され、5日間は安定であると考えられる。

3.1.3. 土壌中安定性

STABILITY IN SOIL

3.2. モニタリングデータ(環境)

MONITORING DATA (ENVIRONMENT)

3.3. 移動と分配

TRANSPORT AND DISTRIBUTION

3.3.1 環境区分間の移動

TRANSPORT BETWEEN ENVIRONMENTAL COMPARTMENTS

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	Fugacity model III
結果	
媒体	大気－水－土壌－底質
環境分布予測と媒体中濃度 (level III/III)	<div>分布(%)</div> <div>大気 水 土壌 底質</div> <div>0.488 15.5 64.2 19.8</div>
結論	<div>分布(%)</div> <div>大気 水 土壌 底質</div> <div>0.488 15.5 64.2 19.8</div>
注釈	EPISUIT(version 3.20)
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法
出典	社内データ
引用文献	
備考	

3.3.2 分配

DISTRIBUTION

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
媒体	水-空気
方法	ヘンリー定数
試験条件	
結果	$2.84 \times 10^{-4} \text{ Pa} \times \text{m}^3/\text{mole}$
結論	$2.84 \times 10^{-4} \text{ Pa} \times \text{m}^3/\text{mole}$
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に認められている計算方法
出典	社内データ
引用文献	
備考	

3.4 好気性生分解性

AEROBIC BIODEGRADATION

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	97.9
注釈	水分: 2.1%
方法	OECD Test Guideline 301F "易分解性" 改良法
培養期間	14日間
植種源	活性汚泥: 神奈川県下水道公社酒匂川左岸下水道終末処理場返送汚泥を採取し、採取日当日に使用した。
GLP	いいえ
試験を行った年	1999
試験条件	実環境中濃度を考慮して試験濃度を下げたため、試験精度の低下を避けるため試験液量を900mLとした。分析法: 固相抽出-HPLC(RI)法
試験物質濃度	10mg/L
汚泥濃度	30mg/L
培養温度 °C	25±1°C
対照物質および濃度(mg/L)	なし
分解度測定方法	閉鎖系酸素消費量測定装置による生物化学的酸素要求量(BOD)の測定 全有機炭素分析法による溶存有機炭素(DOC)の分析 HPLCによる被験物質の分析
分解度算出方法	算術平均
結果	
最終分解度(%) 日目	70% 14日目
分解速度-1	1日目 3%
分解速度-2	2日目 11%
分解速度-3	3日目 28%
分解速度-4	5日目 43%
分解生成物	検出されなかった
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果	全有機炭素分析法によるDOC測定: 98%(14日) HPLCによる被験物質測定: 100%(3日)
対象物質の7, 14日目の分解度	実施せず
その他	
結論	易分解性
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	OECDテストガイドラインに従って実施した非GLP試験
出典	社内データ
引用文献	
備考	

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	不明
注釈	不明
方法	Esso controlled nutrient procedure
培養期間	27
植種源	下水処理場から入手した活性汚泥
GLP	不明
試験を行った年	不明
試験条件	不明
試験物質濃度	40ppm
汚泥濃度	不明

培養温度 °C	25
対照物質および濃度(mg/L)	シュウ酸ナトリウム、50ppm、30 μ L
分解度測定方法	炭素消費量をBeckman carbomaceous analyzerを測定
分解度算出方法	不明
結果	
最終分解度(%) 日目	(%)(日目)
分解速度-1	83%(27日目)
分解速度-2	
分解速度-3	
分解速度-4	
分解生成物	不明
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果	不明
対象物質の7, 14日目の分解度	不明
その他	不明
結論	分解度83%(27日目)
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	選択してください
信頼性の判断根拠	試験条件不明であるが、ピアレビューされた学術文献
出典	
引用文献	文献4
備考	

3.5. BOD-5、CODまたはBOD-5／COD比
BOD-5、COD OR RATIO BOD-5/COD

3.6 生物濃縮性 BIOACCUMULATION

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	BCFWIN v2.17
生物種	
暴露期間 (日)	
曝露濃度	
排泄期間	
GLP	
試験を行った年	2007
分析方法	
試験条件	
被験物質溶液	
対照物質	
対照物質名及び分析方法	その他:下欄のセルに記載
試験方式／実施	
結果	
死亡率／行動	
脂質含有量 (%)	
試験中の被験物質濃度	
濃縮係数(BCF)	70.79
取込／排泄定数	
排泄時間	
代謝物	
その他の観察	
結論	70.79
注釈	
信頼性スコア	2 制限付きで信頼性あり
	キースタディ
信頼性の判断根拠	一般的に用いられている計算方法
出典	社内データ
引用文献	
備考	

項目名 (同一の試験項目について複数の試験がある場合、当該項目行をコピー追加してください。)	データ入力欄
	黄色＝必須項目
	青＝任意項目
	紫＝一部の物質で必須項目

4-0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	<p>脂肪酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (Methyl Ester Sulfonate; 以下、MESと略す) は、脂肪酸メチルエステルの第2位の炭素にスルホン酸が付加した構造をする陰イオン界面活性剤である。現在日本においてMESは主に脂肪酸鎖長の異なるヘキサデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C16-MES) とテトラデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C14-MES) の混合物として生産され、衣料用洗剤に使用されている。これまではC18の成分は工業的に生産されてこなかったが、界面活性剤としての性能等の面から、今後はオクタデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩 (C18-MES) の生産量の増加が予測される。これら3物質は、疎水基に直鎖飽和脂肪族炭化水素を有し、その炭素鎖長のみがC14、C16およびC18と異なる。</p> <p>MESの生態毒性は、魚類の急性毒性及びミジンコに対する長期毒性(21日間繁殖阻害試験)はC14-MES、C16-MES及びC18-MESについて実施され、ミジンコ急性毒性及び藻類生長阻害はC14-MES及びC16-MESについて情報が得られている。</p> <p>MESは陰イオン界面活性剤であり、疎水基の脂肪族炭化水素と親水基の極性基によって脂溶性物質を可溶化する界面活性性を有す。そのため生態生物に対する毒性の強さは細胞膜の脂質層の攪乱と破壊に起因し、炭素鎖長の伸長に伴う疎水性の増加により毒性が強くなると考えられる。魚類に対する毒性は、炭素鎖長の伸長に伴って明らかに強くなっている。ミジンコに対する毒性も、同様の傾向を示している。C18-MESのミジンコへの急性毒性に関するデータは得られていないが、魚類に対する急性毒性の結果から、C14-MESおよびC16-MESのミジンコ急性毒性の結果を基に推定して、48hrEC50は、0.1-1mg/Lと考えられる。一方で、藻類に対するMES類の毒性はC14およびC16MESやLASなどの他の陰イオン界面活性剤と同様に魚類やミジンコに対するものよりも弱いと考えられた。</p>
-------------	--

4-1 魚への急性毒性

ACUTE TOXICITY TO FISH

試験物質	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	CAS番号: 4016-22-2 純度: 96.9%(w/w)、水分: 2.1%(w/w) 製造者名: ライオン株式会社
方法	OECD Test Guideline 203 "魚類急性毒性試験" (1992年)
GLP	いいえ
試験を行った年	1999
魚種、系統、供給者	魚 種: <i>Oryzias latipes</i> (ヒメダカ) 系 統: ー 供給者: 観賞魚販売業者より購入
エンドポイント	96h-LC50
試験物質の分析の有無	なし
試験物質の分析方法	
結果の統計解析手法	暴露開始後24、48、72及び96時間の各濃度区における死亡数と供試個体数から死亡率(%)を求め、プロビット法によりLC50を算出。
試験条件	
試験魚の月齢、体長、体重	不明
試験用水量あたりの魚体重	不明
参照物質での感受性試験結果	実施せず
じゅん化条件	じゅん化期間: 20日間 飼育水の種類: 希釈水 水温: 約23℃ 餌料: 市販観賞魚用飼料
希釈水源	活性炭処理による脱塩素水道水
希釈水の化学的性質	硬度: 50~65mg/L (CaCO3換算) pH : 8.0 DO : 飽和濃度付近
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	蒸留水を用いて200mg/L試験原液を調製し、2L希釈水に必要な量を順次添加して試験液を調製
試験物質の溶液中での安定性	アルキル基炭素数が異なるC16-MESの水中安定性(加水分解性)検討結果では、水中で5日間安定だったことより、当該試験物質も同様に安定と判断
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	使用せず
暴露容器	容器: 塩化ビニル製容器 蓋: なし 通気: なし 試験水量: 2L
暴露期間	96時間
試験方式	半止水
換水率/換水頻度	換水頻度: 48時間当たり1回
連数、1連当たりの魚数	連数: 1容器/試験区 連当り魚数: 7尾/試験区

影響が観察された少なくとも1濃度区及び対照区における水質	対照区：pH8.06(開始時) 3.2mg/L：pH8.00(開始時)－7.50(24h)				
試験温度範囲	測定していない				
照明の状態	室内照明 明暗周期：16h明－8h暗				
平均測定濃度の計算方法	濃度測定を実施していない				
結果					
設定濃度	0(対照)、0.32、0.56、1.0、1.8、3.2及び5.6mg/L				
実測濃度	濃度測定を実施していない				
生物学的影響観察	該当なし				
累積死亡率の表	死亡個体数（死亡率）				
	設定濃度	24h	48h	72h	96h
	対照	0（0）	0（0）	0（0）	0（0）
	0.32	0（0）	0（0）	0（0）	0（0）
	0.56	0（0）	0（0）	5（71.4）	5（71.4）
	1.0	3（42.9）	3（42.9）	6（85.7）	6（85.7）
	1.8	0（0）	0（0）	6（85.7）	6（85.7）
	3.2	7（100）	7（100）	7（100）	7（100）
	5.6	7（100）	7（100）	7（100）	7（100）
統計的結果	LC50(96h)：0.59mg/L (95%信頼区間：0.33～0.87mg/L)				
	LC0(96h)：0.32mg/L				
	LC100(96h)：3.2mg/L				
注釈					
対照区における死亡率	0%				
異常反応	観察されなかった				
その他の観察結果					
結論					
結果(96h-LC50)	設定濃度に基づく、急性毒性値				
	LC50(96h)：0.59mg/L (95%信頼区間：0.33～0.87mg/L)				
信頼性スコア	2. 制限付で信頼性あり				
キースタディ	キースタディ				
信頼性の判断根拠	OECD試験法ガイドラインに従って実施された非GLP試験				
出典	社内データ				
引用文献					
備考					

4-2 水生無脊椎動物への急性毒性(例えばミジンコ)

ACUTE TOXICITY TO AQUATIC INVERTEBRATES (DAPHNIA)

試験物質	
同一性	
方法	
GLP	選択してください
試験を行った年	
生物種、系統、供給者	
エンドポイント	
試験物質の分析の有無	選択してください
試験物質の分析方法	
結果の統計解析手法	
試験条件	
試験生物の起源、前処理、繁殖方法	
参照物質での感受性試験結果	
試験開始時の時間齢	
希釈水源	
希釈水の化学的性質	
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	
試験物質の溶液中での安定性	
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	
暴露容器	
暴露期間	
試験方式	選択してください
連数、1連当たりの試験生物数	
対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質	
試験温度範囲	
照明の状態	
平均測定濃度の計算方法	
結果	
設定濃度	
実測濃度	

遊泳阻害数	
累積遊泳阻害数の表	
注釈	
対照区における反応は妥当か	選択してください
対照区における反応の妥当性の考察	
結論	
結果(48h-EC50)	
信頼性スコア	選択してください
キースタディ	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献	
備考	<p>MESは陰イオン界面活性剤であり、疎水基の脂肪族炭化水素と親水基の極性基によって脂溶性物質を可溶化する界面活性を有す。そのため生態生物に対する毒性の強さは細胞膜の脂質層の攪乱と破壊に起因し、炭素鎖長の伸長に伴う疎水性の増加により毒性が強くなる傾向があるが、ある範囲を超えるとその傾向にはズレを生じる。即ち水溶性が低下すると鎖長に対する影響の強さの相関性の傾斜が緩やかになることが経験的に知られており、MES においても同様な傾向が観察される。</p> <p>ただし、今回、C18-MESの生態影響をカテゴリー評価するに当たっては、影響が強い外側に外挿するため、短鎖側からの作用の鎖長依存性が連続的にそのままの傾向で存在するものとして推定する。</p> <p>C14 及びC16-MESの生態影響に関する試験結果によって示されるように、藻、ミジンコ、魚の3種類の生物の中でミジンコに対して最も感受性が高い(強い)ことが推定されることから、生態系に対するリスクの評価はミジンコに対する長期毒性(繁殖阻害性)をベースに考察するのが適切である。C18-MESのミジンコへの急性毒性に関するデータは得られていないが、魚類に対する急性毒性の結果から、C14-MESおよびC16-MESのミジンコ急性毒性の結果を基に推定して、48hrEC50は、0.1－1mg/Lと考えられた。</p>

4-3 水生植物への毒性(例えば藻類)

TOXICITY TO AQUATIC PLANTS e. g. ALGAE

試験物質	
同一性	
方法	
GLP	選択して下さい
試験を行った年	
生物種、系統、供給者	
エンドポイント	
毒性値算出に用いたデータの種類	
試験物質の分析の有無	選択して下さい
試験物質の分析方法	
結果の統計解析手法	
試験条件	
試験施設での藻類継代培養方法	
藻類の前培養の方法及び状況	
参照物質での感受性試験結果	
希釈水源	
培地の化学的性質	
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法	
試験物質の溶液中での安定性	
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	
暴露容器	
暴露期間	
試験方式	選択して下さい
連数	
各濃度区の少なくとも1連における試験開始時と終了時の水質	
試験温度範囲	
照明の状態	
平均測定濃度の計算方法	
結果	
設定濃度	
実測濃度	
細胞密度	
生長阻害率(%)	
各濃度区における生長曲線	
その他観察結果	
注釈	
対照区での生長は妥当か	選択して下さい
対照区における反応の妥当性の考察	
結論	
結果(ErC50)	

結果 (NOEC)	
信頼性スコア	選択して下さい
キースタディ	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献	
備考	<p>MESは陰イオン界面活性剤であり、疎水基の脂肪族炭化水素と親水基の極性基によって脂溶性物質を可溶化する界面活性を有す。そのため生態生物に対する毒性の強さは細胞膜の脂質層の攪乱と破壊に起因し、炭素鎖長の伸長に伴う疎水性の増加により毒性が強くなる傾向があるが、ある範囲を超えるとその傾向にはズレを生じる。即ち水溶性が低下すると鎖長に対する影響の強さの相関性の傾斜が緩やかになることが経験的に知られており、MES においても同様な傾向が観察される。</p> <p>ただし、今回、C18-MESの生態影響をカテゴリー評価するに当たっては、影響が強い外側に外挿するため、短鎖側からの作用の鎖長依存性が連続的にそのままの傾向で存在するものとして推定する。</p> <p>C14 及びC16-MESの生態影響に関する試験結果によって示されるように、藻、ミジンコ、魚の3種類の生物の中でミジンコに対して最も感受性が高い(強い)ことが推定されることから、生態系に対するリスクの評価はミジンコに対する長期毒性(繁殖阻害性)をベースに考察するのが適切である。藻類に対するMES類の毒性は魚類やミジンコに対するものよりも弱いと考えられた。</p>

4-4 微生物への毒性(例えばバクテリア)

TOXICITY TO MICROORGANISMS e. g. BACTERIA

4-5 水生生物への慢性毒性

CHRONIC TOXICITY TO AQUATIC ORGANISMS

A. 魚への慢性毒性

CHRONIC TOXICITY TO FISH

B. 水生無脊椎動物への慢性毒性

CHRONIC TOXICITY TO AQUATIC INVERTEBRATES

試験物質	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
同一性	CAS番号: 4016-22-2 純度: 98.7%(w/w)、不純物: α -スルホステアリン酸二ナトリウム0.57%(w/w)、メチル硫酸ナトリウム0.05%(w/w)、硫酸ナトリウム0.01%(w/w)、ステアリン酸メチル0.4%(w/w)、水分0.26%(w/w)、製造者名: ライオン株式会社、Lot番号: 060906-1
方法	OECD Test Guideline 211 "オオミジンコ繁殖試験" (1998年)
GLP	はい
試験を行った年	2007
試験生物種	オオミジンコ (<i>Daphnia Magna</i>)
試験物質の分析の有無	あり
試験物質の分析方法	LC-MS
エンドポイント	親ミジンコの半数致死濃度 (LC50)、累積平均産仔数、50%繁殖阻害濃度 (EC50)、最小影響濃度 (LOEC)、最大無影響濃度 (NOEC)
結果の統計解析手法	平均累積生存産仔数: Dunnettの多重比較法 初産日: Kruskal-Wallisの順位和検定 親ミジンコの死亡数: Kruskal-Wallisの順位和検定、Dunnettの多重比較法 (ノンパラメトリック)
試験条件	
助剤使用の有無	あり
助剤の種類、濃度、助剤対照区の有無	助剤の種類: ジメチルホルムアミド (DMF) 試験区での助剤濃度上限: 0.1mL/L 助剤対照区: あり
試験温度	平均: 20±1℃ 最大: 20.3℃
pH	7.3~7.9
硬度	42.7~45.3mgCaCO3/L
試験生物の情報	英国Sheffield大学より分譲されたクローンAの子孫を、化学物質評価研究機構久留米事業所にて継代飼育している成体より産出された生後24時間以内の幼体。対照区有り。
希釈水源	脱塩素水道水
希釈水の化学的性質	pH: 7.9 (22℃)、TOC: 0.2mg/L、TSS: 1mg/L以下、残留塩素0.02mg/L以下
試験溶液 (及び保存溶液) とその調製法	必要量の供試試料を秤量し、DMFに溶解させて0.50×10 ⁴ mg/Lの試験原液を調製し、この試験原液をDMFで適宜希釈して、各濃度区の10 ⁴ 倍の試験原液を調整。調製容器にいれた試験用水を攪拌しながら、必要量の試験原液若しくは助剤を添加して試験液を調製した。

試験物質の溶液中での安定性	設定濃度 (mg/L)	試験開始時	1日目 (交換前)	7日目 (交換後)	8日目 (交換前)	14日目 (交換後)	15日目 (交換前)	幾何平均					
	対照区	n.d	n.d	n.d	n.d	n.d	n.d	－					
	助剤対照区	n.d	n.d	n.d	n.d	n.d	n.d	－					
	0.0313	0.0301 (96.3%)	0.0234 (74.6%)	0.0285 (91.2%)	0.0198 (63.1%)	0.0268 (85.6%)	0.0233 (74.3%)	0.0251 (80.1%)					
	0.0625	0.0569 (91.1%)	0.0525 (83.9%)	0.0507 (81.1%)	0.0456 (72.9%)	0.0549 (87.8%)	0.0467 (74.7%)	0.0510 (81.6%)					
	0.125	0.113 (90.2%)	0.108 (86.4%)	0.115 (92.2%)	0.107 (85.5%)	0.106 (84.8%)	0.0956 (76.5%)	0.107 (85.8%)					
	0.250	0.260 (104%)	0.196 (78.6%)	0.250 (100%)	0.209 (83.5%)	0.225 (89.8%)	0.224 (89.5%)	0.226 (90.5%)					
	0.500	0.538 (108%)	0.449 (89.9%)	0.479 (95.9%)	0.439 (87.7%)	0.469 (93.8%)	0.459 (91.9%)	0.471 (94.3%)					
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度	助剤の種類:ジメチルホルムアミド(DMF) 試験区での助剤濃度上限:0.1mL/L 助剤対照区:あり												
暴露期間	21日間												
暴露容器	試験容器:730mL容(直径9cm、深さ12cm)のガラス製容器 ガラス板で蓋をし、密封した。 1試験区当りの容器数:4 試験は1回/日試験液の全量を交換する半止水方式で行い、エアレーションは行わなかった												
連数、1連当たりの試験生物数	連数:4連/試験区 試験生物数:20頭/試験区(5頭/試験容器)												
照明	室内灯による16時間明(光強度:15～20μE/m ² ・s以下)、8時間暗												
対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質	いずれも飽和濃度60%以上												
平均測定濃度の計算方法	幾何平均												
結果													
設定濃度	0.0313、0.0625、0.125、0.250、0.500 mg/L												
実測濃度	0.0251、0.0510、0.107、0.226、0.471 mg/L												
実測濃度の詳細	設定濃度 (mg/L)	試験開始時	1日目 (交換前)	7日目 (交換後)	8日目 (交換前)	14日目 (交換後)	15日目 (交換前)	幾何平均					
	対照区	n.d	n.d	n.d	n.d	n.d	n.d	－					
	助剤対照区	n.d	n.d	n.d	n.d	n.d	n.d	－					
	0.0313	0.0301 (96.3%)	0.0234 (74.6%)	0.0285 (91.2%)	0.0198 (63.1%)	0.0268 (85.6%)	0.0233 (74.3%)	0.0251 (80.1%)					
	0.0625	0.0569 (91.1%)	0.0525 (83.9%)	0.0507 (81.1%)	0.0456 (72.9%)	0.0549 (87.8%)	0.0467 (74.7%)	0.0510 (81.6%)					
	0.125	0.113 (90.2%)	0.108 (86.4%)	0.115 (92.2%)	0.107 (85.5%)	0.106 (84.8%)	0.0956 (76.5%)	0.107 (85.8%)					
	0.250	0.260 (104%)	0.196 (78.6%)	0.250 (100%)	0.209 (83.5%)	0.225 (89.8%)	0.224 (89.5%)	0.226 (90.5%)					
	0.500	0.538 (108%)	0.449 (89.9%)	0.479 (95.9%)	0.439 (87.7%)	0.469 (93.8%)	0.459 (91.9%)	0.471 (94.3%)					
累積遊泳阻害数	親ジシロの累積死亡数 実測濃度 暴露時間(日)												
	(mg/L)	0	---	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
	対照区	0	---	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	助剤対照区	0	---	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	0.0251	0	---	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	0.0510	0	---	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1
	0.107	0	---	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	0.226	0	---	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1
	0.471	0	---	0	2	6	9	9	9	11	11	13	13
暴露期間 (日)	LC50 (mg/L)	95%信頼区間					統計解析手法						
14	>0.471	－					－						
21	0.401	0.338-0.532					Moving Average						

累積産仔数	親ミジンコの平均累積産仔数																			
	実測濃度 (mg/L)	0	---	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	暴露時間(日)	
	対照区	0	---	0	10.8	10.8	10.8	19.0	19.0	19.0	21.5	43.2	43.2	43.2	61.6	61.6	61.6	80.7		
	助剤対照区	0	---	0	10.2	10.2	10.2	18.8	18.8	18.8	25.2	39.7	39.7	39.7	61.0	61.0	61.0	75.0		
	0.0251	0	---	0	10.0	10.3	10.3	19.8	20.1	20.1	30.3	46.1	46.1	46.1	67.8	67.8	67.8	86.4		
	0.0510	0	---	0	9.1	9.1	9.1	18.0	18.0	18.0	29.8	41.7	41.7	42.8	66.7	66.7	66.7	87.2		
	0.107	0	---	0	13.6	13.6	13.6	26.7	26.7	26.7	50.3	56.8	56.8	62.0	85.2	85.2	85.2	108		
	0.226	0	---	0	18.4	18.4	22.1	43.2	43.2	60.0	92.1	92.1	93.2	129	129	131	163	165		
	0.471	0	---	0	7.9	7.9	7.9	14.5	15.3	18.4	28.5	33.8	33.8	43.2	43.7	43.7	48.5	49.0		
	暴露期間 (日)	EC50 (mg/L)	95%信頼区間				統計解析手法													
14	>0.471	-				-														
21	0.403	Rejection				Binominal														
対照区における反応は妥当か		はい																		
生理的影響		試験結果に影響を与える事項はなかった																		
試験の妥当性		対照群(対照区及び助剤対照区)での親ミジンコの累積死亡率は暴露終了時とともに0%であり、試験成立条件である20%を超えないという基準を満たした。また、対照群(対照区及び助剤対照区)の21日間での親ミジンコ1頭当たりの平均累積産仔数はそれぞれ80.7及び75.0頭であり、試験成立条件である60頭以上の基準を満たした。																		
注釈																				
結論																				
結果(EC50)		EC50:0.403mg/L(実測濃度)																		
結果(NOEC、LOEC)		親ミジンコの死亡率に及ぼす21日間の最大無作用濃度(NOEC):0.226mg/L(実測) 最小作用濃度(LOEC):0.471mg/L(実測)																		
信頼性スコア		1. 制限なく信頼性あり																		
キースタディ		キースタディ																		
信頼性の判断根拠		本試験は、OECD TG 202に準拠して、GLPで実施された試験である。また試験結果に影響を与える要因はなく、試験計画書からの逸脱事項もなかった。																		
出典		社内データ																		
引用文献																				
備考																				

4-6 陸生生物への毒性

TOXICITY TO TERRESTRIAL ORGANISMS

A. 陸生植物への毒性

TOXICITY TO TERRASTRIAL PLANTS

B. 土壌生物への毒性

TOXICITY TO SOIL DWELLING ORGANISMS

C. 他の非哺乳類陸生種(鳥類を含む)への毒性

TOXICITY TO OTHER NON-MAMMALIAN TERRESTRIAL SPECIES (INCLUDING AVIAN)

4-6-1底生生物への毒性

TOXICITY TO SEDIMENT DWELLING ORGANISMS

4-7 生物学的影響モニタリング(食物連鎖による蓄積を含む)

BIOLOGICAL EFFECTS MONITORING (INCLUDING BIOMAGNIFICATION)

4-8 生体内物質変換と動態

BIOTRANSFORMATION AND KINETICS

4-9 追加情報

ADDITIONAL INFORMATION

項目名 (同一の試験項目について複数の試験がある場合、当該項目行をコピー追加してください。)	データ入力欄
	黄色＝必須項目
	青＝任意項目
	紫＝一部の物質で必須項目

5-0 カテゴリー評価

カテゴリー評価の正当性	<p>脂肪酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩(Methyl Ester Sulfonate; 以下、MESと略す)は、脂肪酸メチルエステルの第2位の炭素にスルホン酸が付加した構造をする陰イオン界面活性剤である。現在日本においてMESは主に脂肪酸鎖長の異なるヘキサデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩(C16-MES)とテトラデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩(C14-MES)の混合物として生産され、衣料用洗剤に使用されている。これまではC18の成分は工業的に生産されてこなかったが、界面活性剤としての性能等の面から、今後はオクタデカン酸2-スルホ-1-メチルエステルナトリウム塩(C18-MES)の生産量の増加が予測される。これら3物質は、疎水基に直鎖飽和脂肪族炭化水素を有し、その炭素鎖長のみがC14、C16およびC18と異なる。</p> <p>MESについてのSIDS項目データについてはC14-MESおよびC16-MES(OECD SIAM16において“no further work”と評価済み)について整備されている。</p> <p>なお、C18-MESのハザード評価及び考察においては、C14-MESおよびC16-MESのデータに加えて、化学構造や物性が類似した陰イオン界面活性剤(直鎖アルキルベンゼンスルホン酸(LAS)、アルキルサルフェート(AS))の包括的なデータにより付加的あるいは周辺情報が利用できる。</p> <p>したがって、これらカテゴリー物質および陰イオン界面活性剤の構造、毒性メカニズム、毒性学的な体内動態、代謝経路および毒性学的な類似性を基に、C18-MESの毒性評価を行うことが可能と考える。</p>
-------------	---

5-1 トキシコキネティクス、代謝、分布

TOXICOKINETICS, METABOLISM, and DISTRIBUTION

5-2 急性毒性

ACUTE TOXICITY

A. 急性経口毒性

ACUTE ORAL TOXICITY

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	
方法／ガイドライン	選択してください
GLP適合	選択してください
試験を行った年	
試験系(種／系統)	選択してください
性別(雄:M、雌:F)	選択してください
投与量	
各用量群(性別)の動物数	
溶媒(担体)	選択してください
投与経路	選択してください
観察期間(日)	
その他の試験条件	
統計学的処理	
結果	
各用量群での死亡数	
臨床所見	
剖検所見	
その他	1 制限なく信頼性あり,2 制限付きで信頼性あり,3 信頼性なし,4 信頼性評価不能
結論	
LD50値又はLC50値	
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等	
注釈	
信頼性	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献(元文献)	
備考	<p>C14-MESおよびC16-MESのラット経口急性毒性は弱く、陰イオン界面活性剤に特有の一般症状を示した。陰イオン界面活性剤の急性毒性は、腸管の局所刺激作用が主たる作用と考えられる。一般的に陰イオン界面活性剤の刺激性ポテンシャルは炭素鎖長12-14付近から伸長するにたがって低下することが知られており、C8-C18の炭素鎖長の異なるASを用いた検討においても炭素鎖長の伸長に伴って急性毒性が低下する傾向が示されている。</p> <p>したがって、C18-MESの急性毒性はC16-MESと同等か弱いものと考えられる。</p>

D. 急性毒性(その他の投与経路)
ACUTE TOXICITY, OTHER ROUTES

5-3 腐食性/刺激性
CORROSIVENESS/IRRITATION
A. 皮膚刺激/腐食
SKIN IRRITATION/CORROSION

B. 眼刺激/腐食
EYE IRRITATION/CORROSION

5-4 皮膚感作
SKIN SENSITISATION

5-5 反復投与毒性
REPEATED DOSE TOXICITY

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	
方法/ガイドライン	選択してください
GLP適合	選択してください
試験を行った年	
試験系(種/系統)	選択してください
性別(雄:M、雌:F)	選択してください
投与量	
各用量群(性別)の動物数	
溶媒(担体)	選択してください
投与経路	選択してください
対照群に対する処理	溶媒投与、試験群と同様に処理
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)	
投与頻度	1日1回投与
回復期間(日)	
試験条件	
統計学的処理	
結果	
体重、体重増加量	
摂餌量、飲水量	
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	
眼科学的所見(発生率、重篤度)	
血液学的所見(発生率、重篤度)	
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	
尿検査所見(発生率、重篤度)	
死亡数(率)、死亡時間	
剖検所見(発生率、重篤度)	
臓器重量	
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	
実際に摂取された量	
用量反応性	
注釈	
結論	
NOAEL (NOEL)	
LOAEL (LOEL)	
NOAEL/LOAELの推定根拠	
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等	
注釈	
信頼性	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献(元文献)	

備考	<p>C14-MESおよびC16-MESの反復投与毒性試験において、C14-MESおよびC16-MESは同等の毒性を示し、主な標的組織は主要な代謝経路となる肝臓と考えられた。</p> <p>汎用陰イオン系界面活性剤であるASは、疎水基の炭素鎖長の違いにかかわらず複数の反復投与毒性試験においてMESと類似の毒性様式を示している。ASは、MESと同様に直鎖の飽和脂肪酸炭化水素を疎水基として持ち、末端にスルホン酸からなる極性基を有している。体内に取り込まれたASは肝臓で脂肪酸炭化水素のω酸化とβ酸化によって炭素2分子単位で連続的に切断されて代謝されると考えられており、ラット、イヌ、ヒトの尿中に排泄されるASの主要な代謝物は炭素鎖長4のブチル酸サルフェート(C4-AS)であることが報告されている。MESの哺乳類による代謝は検討されていないが、微生物によってω酸化とβ酸化によって生分解されることが報告されている。生体内においても、MESは類似物質のASと同様にω酸化とβ酸化によって代謝されると推定され、C18-MESは、一度のβ酸化によってC16-フラグメントとなり、以降はβ酸化を繰り返してC16、C14-MESと同様にα-スルホコハク酸モノメチルまで代謝され、排泄されるものと考えられる。MES類はこの代謝過程で肝臓に対して影響を及ぼすと考えられ、したがって、C18-MESはC14-MESあるいはC16-MESと同様の毒性プロファイルを有すると考えられる。</p>
----	--

5-6 *in vitro* 遺伝毒性
GENETIC TOXICITY IN VITRO
A. 遺伝子突然変異
GENE MUTATION

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	
方法／ガイドライン	選択してください
GLP適合	選択してください
試験を行った年	
細胞株又は検定菌	選択してください
代謝活性化(S9)の有無	選択してください
試験条件	
結果	
細胞毒性	
代謝活性ありの場合	
代謝活性なしの場合	
変異原性	
代謝活性ありの場合	
代謝活性なしの場合	
注釈	
結論	
遺伝子突然変異	選択してください
注釈	
信頼性	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献(元文献)	
備考	<p>遺伝子復帰突然変異試験(Ames試験)および哺乳類培養細胞(CHL細胞)を用いた染色体異常試験において、C14-MESおよびC16-MESはS9代謝活性の存在下・非存在下にかかわらず、遺伝毒性を示さなかった。</p> <p>C14-MESあるいはC16-MESは細胞毒性濃度においても遺伝毒性を生じておらず、MESの遺伝子に対する影響はないものと考えられる。したがって、C18-MESについても遺伝毒性はないものと考えられた。</p>

B. 染色体異常
CHROMOSOMAL ABBERATION

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	
方法／ガイドライン	OECD473
GLP適合	選択してください
試験を行った年	
細胞株	選択してください
代謝活性化(S9)の有無	選択してください
試験条件	
結果	
細胞毒性	
代謝活性ありの場合	
代謝活性なしの場合	

染色体異常	
代謝活性ありの場合	
代謝活性なしの場合	
注釈	
結論	
染色体異常	選択してください
注釈	
信頼性	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献(元文献)	
備考	遺伝子復帰突然変異試験(Ames試験)および哺乳類培養細胞(CHL細胞)を用いた染色体異常試験において、C14-MESおよびC16-MESは S9代謝活性の存在下・非存在下にかかわらず、遺伝毒性を示さなかった。 C14-MESあるいはC16-MESは細胞毒性濃度においても遺伝毒性を生じておらず、MESの遺伝子に対する影響はないものと考えられる。したがって、C18-MESについても遺伝毒性はないものと考えられた。

5-7 *in vivo* 遺伝毒性
GENETIC TOXICITY IN VIVO

5-8 発がん性
CARCINOGENICITY

5-9 生殖・発生毒性(受胎能と発生毒性を含む)
REPRODUCTIVE TOXICITY(Including Fertility and Development Toxicity)

A. 受胎能
FERTILITY

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	
方法／ガイドライン	
試験のタイプ	選択してください
GLP適合	選択してください
試験を行った年	
試験系(種／系統)	選択してください
性別(雄:M、雌:F)	選択してください
投与量	
各用量群(性別)の動物数	
溶媒(担体)	選択してください
投与経路	選択してください
試験期間	
交配前暴露期間	
試験条件	
統計学的処理	
結果	
体重、体重増加量	
摂餌量、飲水量	
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	
妊娠率(妊娠個体数/交配数)	
交尾前期間(交配までの日数及び交配までの性周期回数)	
妊娠期間(妊娠0日から起算)	
妊娠指数(生存胎仔数/着床痕数)	
哺乳所見	
性周期変動	
精子所見	
血液学的所見(発生率、重篤度)	
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	
尿検査所見(発生率、重篤度)	
死亡数(率)、死亡時間	
剖検所見(発生率、重篤度)	
着床数	
黄体数	
未熟卵胞数	
臓器重量	

病理組織学的所見(発生率、重篤度)	
実際に摂取された量	
用量反応性	
同腹仔数及び体重	
性比	
生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)	
離乳までの分娩後生存率	
新生仔所見(肉眼的な異常)	
生後発育及び発育率	
陰開口又は精巣下降(包皮分離)	
生殖器-肛門間距離などその他の観察事項	
臓器重量	
統計的結果	
注釈	
結論	
PIに対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	
注釈	
信頼性	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献(元文献)	
備考	<p>C14-MESおよびC16-MESの反復投与毒性試験において、C14-MESおよびC16-MESは同等の毒性を示し、主な標的組織は主要な代謝経路となる肝臓と考えられた。</p> <p>汎用陰イオン系界面活性剤であるASIは、疎水基の炭素鎖長の違いにかかわらず複数の反復投与毒性試験においてMESと類似の毒性様式を示している。ASIは、MESと同様に直鎖の飽和脂肪族炭化水素を疎水基として持ち、末端にスルホン酸からなる極性基を有している。体内に取り込まれたASIは肝臓で脂肪族炭化水素のω酸化とβ酸化によって炭素2分子単位で連続的に切断されて代謝されると考えられており、ラット、イヌ、ヒトの尿中に排泄されるASの主要な代謝物は炭素鎖長4のブチル酸サルフェート(C4-AS)であることが報告されている。MESの哺乳類による代謝は検討されていないが、微生物によってω酸化とβ酸化によって生分解されることが報告されている。生体内においても、MESは類似物質のASと同様にω酸化とβ酸化によって代謝されると推定され、C18-MESは、一度のβ酸化によってC16-フラグメントとなり、以降はβ酸化を繰り返してC16、C14-MESと同様にα-スルホコハク酸モノメチルまで代謝され、排泄されるものと考えられる。MES類はこの代謝過程で肝臓に対して影響を及ぼすと考えられ、したがって、C18-MESはC14-MESあるいはC16-MESと同様の毒性プロファイルを有すると考えられる。</p> <p>また、推定される代謝経路等の類似性からC14-MESおよびC16-MESと同様にC18-MESは生殖/発生毒性を示さないものと考えられる。</p>

B. 発生毒性

DEVELOPMENTAL TOXICITY

試験物質名	Octadecanoic acid, 2-sulfo-, 1-methyl ester, sodium salt
CAS番号	4062-78-6
純度等	
注釈	
方法	
方法／ガイドライン	
GLP適合	選択してください
試験を行った年	
試験系(種／系統)	選択してください
性別(雄:M、雌:F)	選択してください
投与量	
各用量群(性別)の動物数	
投与経路	選択してください
試験期間	
交配前暴露期間	
試験条件	
統計学的処理	
結果	
死亡数(率)、死亡時間	
用量あたり妊娠数	
流産数	
早期/後期吸収数	

着床数	
黄体数	
妊娠期間(妊娠0日から起算)	
体重、体重増加量	
摂餌量、飲水量	
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)	
血液学的所見(発生率、重篤度)	
血液生化学的所見(発生率、重篤度)	
剖検所見(発生率、重篤度)	
臓器重量(総子宮量への影響)	
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	
同腹仔数及び体重	
生存数(生存胎仔数及び胎仔数)	
性比	
生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)	
生後発育	
分娩後生存率	
肉眼的異常(外表観察、内臓標本、骨格標本)	
実際に投与された量	
用量反応性	
統計的結果	
注釈	
結論	
PIに対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	
注釈	
信頼性	選択してください
信頼性の判断根拠	
出典	
引用文献(元文献)	
備考	<p>C14-MESおよびC16-MESの反復投与毒性試験において、C14-MESおよびC16-MESは同等の毒性を示し、主な標的組織は主要な代謝経路となる肝臓と考えられた。</p> <p>汎用陰イオン系界面活性剤であるASは、疎水基の炭素鎖長の違いにかかわらず複数の反復投与毒性試験においてMESと類似の毒性様式を示している。ASは、MESと同様に直鎖の飽和脂肪族炭化水素を疎水基として持ち、末端にスルホン酸からなる極性基を有している。体内に取り込まれたASは肝臓で脂肪族炭化水素のω酸化とβ酸化によって炭素2分子単位で連続的に切断されて代謝されると考えられており、ラット、イヌ、ヒトの尿中に排泄されるASの主要な代謝物は炭素鎖長4のブチル酸サルフェート(C4-AS)であることが報告されている。MESの哺乳類による代謝は検討されていないが、微生物によってω酸化とβ酸化によって生分解されることが報告されている。生体内においても、MESは類似物質のASと同様にω酸化とβ酸化によって代謝されると推定され、C18-MESは、一度のβ酸化によってC16-フラグメントとなり、以降はβ酸化を繰り返してC16、C14-MESと同様にα-スルホコハク酸モノメチルまで代謝され、排泄されるものと考えられる。MES類はこの代謝過程で肝臓に対して影響を及ぼすと考えられ、したがって、C18-MESはC14-MESあるいはC16-MESと同様の毒性プロファイルを有すると考えられる。</p> <p>また、推定される代謝経路等の類似性からC14-MESおよびC16-MESと同様にC18-MESは生殖/発生活性を示さないものと考えられる。</p>

5-10その他関連情報
OTHER RELEVANT INFORMATION

5-11 ヒト暴露の経験
EXPERIENCE WITH HUMAN EXPOSURE

6 参考文献(以下に欄を追加の上、一文献について一行にて一覧を記載)

文献番号(半角数字: 自動的に半角になります)	詳 細(OECD方式での記入をお願いします。下の記入例参照。)	日本語の場合、以下の欄をお願いします。
1	Weil JK, Bistline RG Jr., and Stirton AJ (1953) Sodium Salts of Alkyl α -Sulfopalmitates and Stearates, J Am Chem Soc, 75, 4859-4860	
2	Fujiwara M, Miyake M, and Abe, Y (1993) Colloidal properties of α -sulfonated fatty acid methyl esters and their applicability in hard water, Colloid Polym Sci, 271, 780-785	
3	UNEP PUBLICATIONS (2003) SIDS Initial Assessment Report For SIAM 16, 27-30	
4	Maurer EW, Weil JK, and Linfield WM (1977) The Biodegradation of Esters of α -Sulfo Fatty Acids, J Am Oil Chem Soc, 54, 582-584	
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19		
20		
21		
22		
23		