

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

2. 植物体内運命試験

1) 稲における代謝（浸透・移行性、フェニル標識体処理）

（資料No.7）

試験機関：

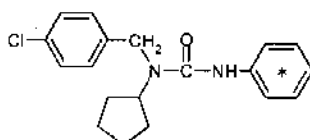
報告年月日：1981年6月22日

供試化合物：

化学名； 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

フェニル ¹⁴C 標識体

化学構造；



*¹⁴C 標識位置

放射化学的純度；
比放射能；

供試植物：稲（品種；コシヒカリ）、温室内で 1/5000a ポットで栽培した。

試験方法：

処理及び試料採取；

供試化合物 0.2mg（標識化合物 + 非標識化合物）、ベンゼン 33 μ L 及び乳化剤 5 μ L を混合し、水を加えて乳化液 1mL を調製した。50%出穂期に、上位 3 葉（止葉を含む）の各葉に以下のとおりこの乳化液を塗布し、試料採取した。

①葉面における放射能分布

各葉の葉先端から 9~11cm の範囲に 10 μ L/葉で片面 5 μ L ずつ塗布した。処理 0、1、3、6、10、17、24、31、40 日後に各葉を採取し、表面（葉先端から 20cm まで）をジエチルエーテルで 3 回洗浄した。洗浄後の葉は、塗布部より上部（葉先端 0~8.5cm）、塗布部（8.5~11.5cm）、塗布部より下部（11.5~20cm）に分離した。ジエチルエーテル洗液及び洗浄後の葉の各部位における放射能を液体シンチレーションカウンター（LSC）で測定した。

②オートラジオグラフィ

各葉の葉先端から 9~11cm の範囲に 10 μ L/葉で片面 5 μ L ずつ塗布し、さらに各葉の葉鞘の上部から 3~5cm の範囲（外表面）に 3~4 μ L を塗布した。処理 1、6、17、31 日後に植物を採取し、乾燥後、オートラジオグラムを作成した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はパイエルクロップサイエンス株式会社にある。

結果：

①葉面における放射能分布

処理放射エネルギーの 81.1%以上がジエチルエーテル洗液及び洗浄後の葉から回収された。処理 40 日後では 57.2%がジエチルエーテル洗液、30.3%が洗浄後の葉に分布した。洗浄後の葉に認められた放射能は主に塗布部に存在した。塗布部の上部及び下部にも放射能が検出されたが上部のほうが多く、先端方向への移行が下方移行に優先して認められた。

表1、各部位への放射能分布（処理放射エネルギーに対する割合%）

	0日	1日	3日	6日	10日	17日	24日	31日	40日
ジエチルエーテル洗液	99.4	86.6	80.0	85.4	78.5	72.5	41.6	59.3	57.2
洗浄後の葉	0.5	6.9	14.4	11.9	16.1	21.2	39.5	30.2	30.3
塗布部	0.4	6.6	12.8	9.8	12.9	15.1	26.9	19.4	19.4
上部	0.0	0.2	1.4	1.8	2.8	5.5	10.9	8.4	7.2
下部	0.1	0.1	0.2	0.3	0.4	0.6	1.7	2.4	3.7
合計	100.0	93.5	94.5	97.4	94.7	93.6	81.1	89.4	87.5

②オートラジオグラフィ

処理1日後に放射能は塗布部のみに認められた。6日後には葉において上方への移行が認められ、17及び31日後には葉鞘部においても上方への移行が認められた。下方への移行は認められなかった。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

2) 稲における代謝（葉における代謝、フェニル標識体処理）

(資料No.8)

試験機関：

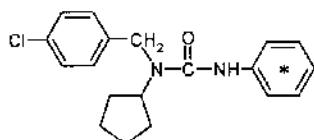
報告年月日：1981年7月15日

供試化合物：

化学名； 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

フェニル ^{14}C 標識体

化学構造；



* ^{14}C 標識位置

放射化学的純度；

比放射能；

供試植物：稲（品種；コシヒカリ）、温室内で 1/5000a ポットで栽培した。

処理及び試料採取；

供試化合物 1.5mg を含むベンゼン溶液 0.25mL と乳化剤 0.05mL を混合し、蒸留水 7.2mL を加えて供試化合物濃度 200ppm の乳化液 7.5mL を調製した。50%出穂期に、上位3葉（止葉を含む）の各葉（長さ約 25cm の区域）にこの乳化液を 100 μL /葉で片面 50 μL ずつ塗布した。処理 1、5、10、15、20、25、30、40 日後に葉を採取した。

抽出及び分析；

葉をジエチルエーテルで洗浄し、洗液を採取した。洗浄後の葉を液体窒素中で粉碎後、アセトン、次いでクロロホルムで抽出し、これらの抽出液に水を加えて振とうして有機層と水層に分離した。一部の試料のクロロホルム抽出後の固体残渣をさらに 80%メタノールで浸漬抽出し、抽出液を濃縮後、水/クロロホルムで分配して有機層と水層に分離した。この水層を加水分解（37 $^{\circ}\text{C}$ 、24 時間）し、酢酸エチルで抽出した。

抽出及び分画後の各面分中の放射能を液体シンチレーションカウンター（LSC）で測定した。洗液、有機層及び水層中の親化合物及び代謝分解物を薄層クロマトグラフィー（TLC）で分析した。

結果；

洗液及び有機層の分析結果；

ジエチルエーテル洗液に回収された放射能は処理1日後に処理放射エネルギーの94.3%であり、その後は40日後の43.8%まで時間とともに減少した。アセトン及びクロロホルム抽出後の有機層に回収された放射能は1日後に処理放射エネルギーの5.5%で、その後は増加し、20日後には13.5%、40日後には13.4%であった。

残留放射能の大部分は親化合物[I]であった。表面洗液と抽出後の有機層を合計すると、親化合物は1日後に処理放射エネルギーの97.8%、10日後に74.1%、20日後に69.7%、40日後に51.5%残存

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

した。代謝分解物として [II]、 [IV]、 [VI] が認められ、これらの代謝分解物の生成量はいずれも処理放射エネルギーの1%未満であった。

表1、洗液及び有機層（処理放射エネルギーに対する割合%）

	1日	10日	20日	40日
<u>ジエチルエーテル洗液</u>				
親化合物 [I]	92.6	64.7	59.2	41.2
[II]	0.1	0.5	0.4	0.2
[IV]	0.5	0.5	0.3	0.2
その他 ¹⁾	1.1	2.8	4.6	2.2
小計	<u>94.3</u>	<u>68.5</u>	<u>64.5</u>	<u>43.8</u>
<u>アセトン、クロロホルム抽出後の有機層</u>				
親化合物 [I]	5.2	9.4	10.5	10.3
[II]	n.d.	0.2	0.4	0.3
[IV]	0.1	0.1	0.1	0.2
[VI]	n.d.	0.1	0.1	0.3
[VI]	n.d.	0.1	0.2	0.2
その他 ¹⁾	0.3	1.0	2.2	1.9
小計	<u>5.5</u>	<u>10.9</u>	<u>13.5</u>	<u>13.4</u>
合計 ²⁾	<u>99.8</u>	<u>79.4</u>	<u>78.0</u>	<u>57.2</u>

¹⁾ TLC上の原点及び2~4種類の未同定スポット等で、合計を申請者が算出した。

²⁾ 合計は申請者が算出した。

水層の分析結果：

25日後試料では、アセトン及びクロロホルム抽出物を分配後の水層に処理放射エネルギーの1.6%、80%メタノール抽出物を分配後の水層に3.7%の放射能が認められた。80%メタノール抽出後の水層を酵素処理した後にTLC分析すると、数種類のアグリコンが認められ、そのうち2種類は [VI]と推定された。このことから代謝物VIの の存在が示唆された。

表2、25日後試料の抽出・分画後の放射能分布（処理放射エネルギーに対する割合%）

	25日
ジエチルエーテル洗液	53.8
アセトン、クロロホルム抽出後の有機層	17.7
アセトン、クロロホルム抽出後の水層	1.6
80%メタノール抽出後の有機層	2.7
80%メタノール抽出後の水層	3.7
未抽出画分	4.7
合計	84.2

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

推定代謝経路；

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

3) 稲における代謝（白米及び糠における代謝、フェニル標識体処理）

(資料No.9)

試験機関：

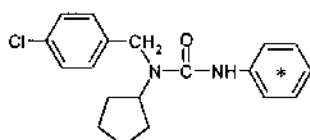
報告年月日：1981年7月25日

供試化合物：

化学名； 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

フェニル ^{14}C 標識体

化学構造；



* ^{14}C 標識位置

放射化学的純度；

比放射能；

供試植物：稲（品種；コシヒカリ）、温室内で 1/5000a ポットで栽培した。

処理及び試料採取；

1 回当たり約 1kg a.i./ha で、合計 2 回茎葉散布した。各処理につき、供試化合物 2mg を含むベンゼン溶液 0.33mL と乳化剤 0.05mL を混合し、蒸留水を加えて供試化合物濃度 133ppm の乳化液 15mL を調製し、15mL/容器で散布した。1 回目の処理は出穂前、2 回目の処理は 50% 出穂期に行った。2 回目散布の 63 日後に稲の地際部を切断して採取し、穂、葉身及び葉鞘+茎に分離した。穂は籾殻と玄米に分離し、玄米は白米と糠に分離した。また、土壌（根を含む）を 4 層（表層 0~1.5cm、1.5~3cm、3~4.5cm、4.5~15cm）に分けて採取し、乾燥後、土壌と根に分離した。

抽出及び分析；

白米及び糠を 80%メタノールで抽出し、抽出液を濃縮後、残った水層を Extrelut カラムに供してヘキサン、酢酸エチル、含水ブタノール、飽和食塩水で順次溶出した。80%メタノール抽出後の未抽出画分を 6N 塩酸又は 6N 水酸化ナトリウム溶液で 1 時間還流した後、水を加えて酢酸エチルで抽出し（酢酸エチル抽出 1）、pH を逆にしてさらに酢酸エチルで抽出した（酢酸エチル抽出 2）。酸又はアルカリ加水分解中に発生した揮発性物質はキシレン又はメチルセロソルブ/エタノールアミン（1/1）を含む捕集装置に捕集した。

土壌及び各植物試料を粉砕し、燃焼して液体シンチレーションカウンター（LSC）で放射能測定した。抽出及び分画後の各画分中の放射能を LSC で測定した。各カラム溶出画分中の親化合物及び代謝分解物を薄層クロマトグラフィー（TLC）で分析した。未抽出画分を加水分解した後の酢酸エチル抽出物（塩基性条件下）については、アセチル化後に TLC 分析して ^{14}C -アニリンの存在を確認した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

結果：

残留量及び放射能分布；

2回処理63日後の植物地上部には処理放射エネルギーの30%、根には0.04%、土壌には1.7%の放射能が回収された。植物地上部に認められた放射能の大部分は散布部位（籾殻、葉身、葉鞘+茎）に認められ、玄米には処理放射エネルギーの0.4%（0.56ppm）が分布した。

玄米を白米と糠に分離すると、白米と糠の重量比は85.8：14.2であった。白米には玄米中の放射能の15.4%（0.10ppm）、糠には84.6%（3.32ppm）が分布し、玄米中の放射能は主に糠に認められた。

表1、各部位における残留量（ppm）及び放射能分布（%）

	ppm	処理放射エネルギーに対する割合%
玄米	0.56	0.4
籾殻	7.50	1.3
葉身	82.27	26.9
葉鞘+茎	2.20	1.4
} 合計 30.0%		
根 0~1.5cm	1.39	全体で 0.04%
1.5~3.0cm	0.41	
3.0~4.5cm	0.29	
4.5~15cm	0.19	
土壌 0~1.5cm	0.19	全体で 1.7%
1.5~3.0cm	0.05	
3.0~4.5cm	0.01	
4.5~15cm	<0.005	

表2、白米及び糠における残留量（ppm）及び放射能分布（%）

	重量比	ppm	玄米中の割合%
白米	85.8	0.10	15.4
糠	14.2	3.32	84.6

代謝；

80%メタノールに抽出された放射能は白米で回収放射エネルギーの85.8%、糠で26.5%であった。ヘキサン溶出画分中の主な成分は白米と糠のいずれにおいても親化合物[I]で、白米ではヘキサン溶出画分中の放射能の約88%、糠では約79%に相当した。酢酸エチル溶出画分のTLCパターンは白米と糠で類似しており、少量の親化合物が認められた他、[VI]と2種類の未同定成分が認められた。含水ブタノール溶出画分及び飽和食塩水溶出画分をTLC分析すると高極性成分が認められたが、同定できなかった。これらの結果から、親化合物の残留量は玄米で0.018ppm、白米で0.003ppmであった。

80%メタノール抽出後の未抽出画分を酸又はアルカリ加水分解すると、抽出及び分画後の放射能分布は白米と糠で異なった。このことは白米と糠の構成成分に差があるためとも考えられるが、未抽出残留物の性質が白米と糠で異なることも推定された。また、糠の酢酸エチル抽出物中に の存在が確認されたことから、親化合物の基本骨格に近い代謝分解物又は[XVIII]が生体成分と結合して存在する可能性が示唆された。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表3、抽出・分画後の放射能分布（各部位の回収放射能に対する割合％）

	白米	糠
80%メタノール抽出液	35.8	26.5
ヘキサン溶出画分	3.3	3.3
酢酸エチル溶出画分	9.8	4.1
含水ブタノール溶出画分	10.5	10.9
飽和食塩水溶出画分	12.2	8.2
未抽出画分	64.2	73.5
合計	100.0	100.0

表4、酸又はアルカリ加水分解後の放射能分布（％）

	白米		糠	
	6N HCl	6N NaOH	6N HCl	6N NaOH
未抽出画分				
キシレントラップ	2.9	1.7	0.9	0.3
メチルセロソルブ [*] /エタノールアミントラップ [*]	0.8	1.9	0.6	1.0
酢酸エチル抽出液1	14.6 ^{a+n}	6.1 ^{b+n}	5.6 ^{a+n}	20.1 ^{b+n}
酢酸エチル抽出液2	5.6 ^b	13.8 ^a	21.9 ^b	26.1 ^a
水層（抽出残）	—	—	6.4	27.9
合計	24.0	23.5	35.3	75.3

—：測定せず。a：酸性画分。b：塩基性画分。n：中性画分

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

4) 稲における代謝（茎葉、脱穀後の穂及び籾における代謝、クロロベンジル標識体処理）
(資料 No.10)

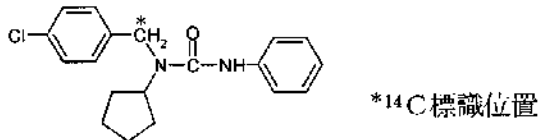
試験機関：
報告年月日： 1993年5月13日

供試化合物：

化学名； 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

クロロベンジル ¹⁴C 標識体

化学構造；



放射化学的純度；

比放射能；

供試作物； 稲（品種；Lamonte）、温室内で容器で栽培した。

処理及び試料採取；

1 回当たり 20 オンス a.i./ エーカー（約 1.4kg a.i./ha）で、合計 2 回散布した。各処理につき、供試化合物約 0.209g（標識化合物 + 非標識化合物）、50WP 製剤白試料約 0.209g、水 175mL を用いて処理溶液を調製し、各容器に 25mL を散布した。1 回目の処理は播種 116 日後（穂ばらみ期の初期）に行い、その 14 日後（出穂期の初期）に 2 回目の処理を行った。1 回処理直後/Day0 に茎葉（発達中の幼穂を含む）を水面から 2cm の高さで切り取って採取した。また、2 回処理 22 日後/Day36 に穂及び茎葉を採取し、穂は乾燥後に籾と脱穀後の穂に分離した。

抽出及び分析；

茎葉をメタノールで洗浄し、洗液を採取した。メタノール洗浄後の茎葉を液体窒素中で均質化し、メタノール/水（4/1、v/v）で抽出した後、抽出液を濃縮し、残った水層をクロロホルムで分配してクロロホルム層と水層に分離した。

脱穀後の穂を液体窒素中で均質化し、メタノール/水（4/1、v/v）で抽出した後、抽出液を濃縮し、残った水層をクロロホルムで分配してクロロホルム層と水層に分離した。

籾を液体窒素中で均質化し、メタノール/水（4/1、v/v）で抽出した後、抽出液を濃縮し、残った水層を固相抽出してメタノール画分と水面分に分離した。

各植物試料を粉砕し、燃焼して液体シンチレーションカウンター（LSC）で放射能測定した。抽出及び分画後の各画分中の放射能を LSC で測定した。メタノール洗液、メタノール/水抽出後の有機層（クロロホルム層及びメタノール画分）中の親化合物及び代謝分解物を薄層クロマトグラフィー（TLC）で定量した。TLC 及び高速液体クロマトグラフィー（HPLC）での標準品との比較並びに MS スペクトル分析で同定した。

結果；

残留量；

茎葉における残留量は 1 回処理直後（Day0）で 3.4ppm、2 回処理 22 日後（Day36）で 11.5ppm であった。また、穂で 15.8ppm、籾で 6.0ppm であった。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表1、残留量

	ppm
茎葉 (Day0)	3.4
茎葉 (Day36)	11.5
穂 (Day36)	15.8
籾 (Day36)	6.0

代謝；

茎葉では、メタノール洗液に回収放射エネルギーの71.1% (Day0) 及び40.7% (Day36)、メタノール/水抽出液に27.3% (Day0) 及び54.2% (Day36) の放射能が回収され、3.9%以下が未抽出であった。また、脱穀後の穂では回収放射エネルギーの98.3%、籾では97.3%がメタノール/水に抽出された。いずれの部位においても主な残留成分は親化合物[I]で、茎葉では表面洗液と抽出液を合計するとDay0で回収放射エネルギーの94.4%、Day36で88.9%、脱穀後の穂では91.6%、籾では85.0%に相当した。茎葉には [II] も同定され、その生成量は回収放射エネルギーの0.2%以下であった。

表2、茎葉 (回収放射エネルギーに対する割合%)

	茎葉	
	Day0	Day36
<u>メタノール洗液</u>		
親化合物[I]	69.5	40.1
原点	1.6	0.6
小計	71.1	40.7
<u>メタノール/水抽出液</u>		
有機層		
親化合物[I]	24.9	48.8
[II]	0.0	0.2
その他 ¹⁾	0.6	4.0
水層	1.8	1.2
小計	27.3	54.2
<u>未抽出画分</u>	1.6	3.9
合計	99.8	100.3

¹⁾ TLC 原点に認められた放射能及び未同定成分等で、合計を申請者が算出した。

表3、脱穀後の穂及び籾 (回収放射エネルギーに対する割合%)

	脱穀後の穂	籾
	Day36	Day36
<u>メタノール/水抽出液</u>		
有機層		
親化合物[I]	91.6	85.0
原点	5.4	10.9
水層	1.3	1.4
小計	98.3	97.3
<u>未抽出画分</u>	1.8	2.6
合計	100.1	99.9

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

5) ばれいしょにおける代謝（フェニル標識体、シクロペンチル標識体処理）

(資料No.11)

試験機関：

報告年月日：1983年7月14日

供試化合物：

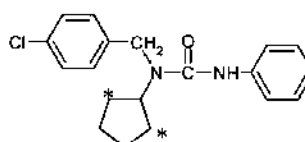
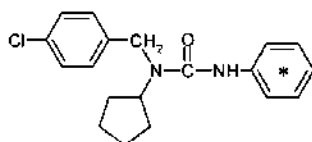
化学名： 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

フェニル ^{14}C 標識体

シクロペンチル ^{14}C 標識体

化学構造；

化学構造；



* ^{14}C 標識位置

放射化学的純度；

比放射能；

放射化学的純度；

比放射能；

供試植物：ばれいしょ（品種；シマバラ）

処理及び試料採取；

種いも 100kg 当り 25g a.i. で処理した。10% 乳剤 150mg (フェニル標識体処理でシクロペンチル標識体処理で) を水 0.6mL で希釈して種いも約 60g に処理し、1/5000a ポットに植付けて温室内で栽培した。栽培土壌として静岡土壌（沖積砂壤土）及び牛久土壌（火山灰シルト質壤土）を用いた。植付 14、56、133 日後（収穫期）に土壌及び植物全体を採取し、植物を茎葉、根、塊茎（56、133 日後のみ）及び種いもに分離した。

抽出及び分析；

茎葉、根及び塊茎は液体窒素中で粉碎後、80%アセトンで抽出した。抽出液をそれぞれ濃縮し、残った水層を酢酸エチルで分配して酢酸エチル層と水層に分離した。水層を加水分解（ ）し、酢酸エチルで抽出した後、酵素処理後の水層をさらに 1N 塩酸で加水分解（ ）した。種いもはアセトン/クロロホルム（2：1 v/v）で洗浄後、粉碎して 80%アセトンで抽出した。

塊茎の 80%アセトン抽出後の未抽出画分は を加えて均質化（ ）後にろ過し、ろ液中に沈殿したデンプン采取了。デンプンは 10%塩酸で加水分解（ ）後に し、再結晶して を得た。

各植物試料及び土壌を粉碎し、燃焼して液体シンチレーションカウンター（LSC）で放射能測定した。デンプン、 並びに抽出及び分画後の各画分中の放射能を LSC で測定した。80%アセトン抽出後の酢酸エチル層、酵素又は酸処理後の酢酸エチル層中の親化合物及び代謝分解物を薄層クロマトグラフィ（TLC）で分析した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイオクロップサイエンス株式会社にある。

結果：

残留量及び放射能分布；

収穫期（133日後）の残留量は、茎葉で0.20～0.28ppm、根で0.85～1.02ppm、塊茎で0.04～0.06ppmであった。

処理放射エネルギーの79.5%以上の放射能が回収され、その多くが種いもに分布した。茎葉、根及び塊茎への分布割合は時間の経過とともに増加したが、合計で処理放射エネルギーの1%未満であった。そのうちの多くは茎葉及び根に分布し、塊茎に認められた放射能は最大で処理放射エネルギーの0.08%とわずかであった。

表1、残留量（ppm）

	フェニル標識体処理			シクロペンチル標識体処理		
	14日	56日	133日	14日	56日	133日
茎葉	1.25	1.08	0.28	1.24	1.12	0.20
根	2.03	1.20	0.85	1.84	1.44	1.02
塊茎	—	0.10	0.06	—	0.12	0.04

—：該当せず。

表2、各部位への放射能分布（処理放射エネルギーに対する割合%）

	フェニル標識体処理						シクロペンチル標識体処理		
	静岡土壌 ¹⁾			牛久土壌 ¹⁾			静岡土壌 ¹⁾		
	14日	56日	133日	14日	56日	133日	14日	56日	133日
茎葉	0.09	0.29	0.51	0.09	0.21	0.46	0.07	0.28	0.43
根	0.08	0.21	0.32	0.06	0.17	0.33	0.06	0.24	0.29
塊茎	—	0.01	0.08	—	0.02	0.08	—	0.01	0.06
(小計)	(0.17)	(0.51)	(0.91)	(0.15)	(0.40)	(0.87)	(0.13)	(0.53)	(0.78)
種いも	81.6	76.6	64.7	82.6	78.3	59.5	83.2	76.5	64.3
土壌	10.1	14.7	18.6	9.1	12.7	19.1	9.4	13.2	20.8
合計	91.9	91.8	84.2	91.9	91.4	79.5	92.7	90.2	85.9

¹⁾ 静岡土壌を用いて栽培したばれいしょの分析結果、又は牛久土壌を用いて栽培したばれいしょの分析結果。 —：該当せず。

代謝；

茎葉；

80%アセトン抽出後の酢酸エチル層には茎葉の回収放射エネルギーの28.2～44.4%が分布し、主な残留成分は親化合物[I]であった。 [XVI]が56日後に最大5.4%、 [IV]が56日後に最大2.7%（フェニル標識体処理）及び1.8%（シクロペンチル標識体処理）認められた他、 [II]、 [V]、 [VI]、 [VII]が同定され、これらの代謝分解物はいずれも回収放射エネルギーの1.1%以下であった。

80%アセトン抽出後の水層を 又は すると合計約8～14%の放射能が遊離し、 [V]、 [VI]、 [VII]、 [XVI]が同定された。両画分を合計すると代謝物VIは133日後に最大9.9%（フェニル標識体処理）及び8.3%（シクロペンチル標識体処理）、代謝物Vは56日後に2.3%（フェニル標識体処理）及び2.4%（シクロペンチル標識体処理）検出され、代謝物VII及びXVIはいずれも回収放射エネルギーの1%以下であった。これらの結果から、親化合物[I]の （代謝物V、VI、VII）の の存在が示唆された。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表3、茎葉（回収放射能量に対する割合%）

	フェニル標識体処理		シクロペンチル標識体処理	
	56日	133日	56日	133日
酢酸エチル層	44.4	28.2	40.9	35.1
親化合物[I]	34.2	21.7	31.9	26.2
[II]	0.6	0.1	*	*
[IV]	2.7	0.5	1.8	0.3
[V]	0.9	0.7	0.9	0.7
[VI] ^D	1.1	0.9	0.8	0.8
[VIII]	0.8	0.6	*	*
[XVI]	*	*	5.4	3.0
その他	4.1	3.7	0.1	4.1
水層				
酵素処理後の遊離放射能	8.1	7.7	6.7	5.5
[V]	2.3	<0.1	2.4	<0.1
[VI] ^D	3.8	5.6	3.1	4.1
[VII] ^D	<0.1	0.6	<0.1	0.4
その他	2.0	1.5	1.2	1.0
酸処理後の遊離放射能	1.2	5.8	1.1	6.1
[V]	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
[VI] ^D	0.4	4.3	0.6	4.2
[VII] ^D	<0.1	0.2	<0.1	0.2
[XVI]	*	*	<0.1	0.2
その他	0.8	1.3	0.5	1.5
酸処理後の水層	11.8	13.1	21.8	8.0
合計 ²⁾	65.5	54.8	70.5	54.7

*：供試化合物の標識位置に基づき、該当せず。

^D 代謝物VI及びVIIの数値は

。 ²⁾ 合計は申請者が算出した。

根：

80%アセトン抽出後の酢酸エチル層における主な残留成分は親化合物[I]であった。 [IV]が56日後に最大3.9%（フェニル標識体処理）及び2.0%（シクロペンチル標識体処理）、[XVI]が133日後に最大2.8%認められた他、 [II]、 [V]、 [VI]、 [VIII]が同定され、これらの代謝分解物はいずれも回収放射能量の1.5%以下であった。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表4、根（回収放射エネルギーに対する割合%）

	フェニル標識体処理		シクロペンチル標識体処理	
	56 H	133 日	56 日	133 日
酢酸エチル層	67.6	11.6	46.7	16.8
親化合物 [I]	53.3	8.4	38.8	9.2
[II]	0.1	0.1	*	*
[IV]	3.9	0.2	2.0	0.5
[V]	1.5	0.3	1.4	0.8
[VI] ^d	1.4	0.3	0.9	0.8
[VII]	1.0	0.1	*	*
[XVI]	*	*	2.7	2.8
その他	6.4	2.3	0.9	2.7

*：供試化合物の標識位置に基づき、該当せず。 d) 代謝物VIの数値は

塊茎；

80%アセトン抽出後、酢酸エチル層には塊茎の回収放射エネルギーの10.1~13.9%、水層には10.3~26.2%が分布し、61.3~79.6%の放射エネルギーが未抽出であった。酢酸エチル層には親化合物 [I] が回収放射エネルギーの6.4~8.5%、[XVI]が0.2%認められた。その他に極性成分がTLC原点付近に2.6~5.9%認められたが、同定できなかった。また、水層を又は酸処理すると、茎葉で認められたようなアグリコンは検出されなかった。80%アセトン抽出後の未抽出画分中の放射エネルギーの多くはデンプン及びグルコースとして回収され、処理放射エネルギーはデンプンを構成するグルコース分子に取り込まれたと推定された。

表5、塊茎（回収放射エネルギーに対する割合%）

	フェニル標識体処理		シクロペンチル標識体処理	
	56 日	133 日	56 日	133 日
酢酸エチル層	13.9	10.9	12.5	10.1
親化合物 [I]	8.5	7.7	6.4	7.5
[XVI]	*	*	0.2	n.d.
未同定極性成分	5.4	3.2	5.9	2.6
水層	24.4	18.6	26.2	10.3
未抽出画分	61.7	70.5	61.3	79.6
デンプン	—	58.3	—	52.6
グルコース ^{a)}	—	48.2	—	44.3
合計	100	100	100	100

*：供試化合物の標識位置に基づき、該当せず。 —：分析せず。

a)：デンプンを塩酸加水分解して得られたグルコース中の放射エネルギー

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

推定代謝経路；

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はパイエルクロップサイエンス株式会社にある。

6) ばれいしょにおける代謝 (クロロベンジル標識体処理)

(資料No.12)

試験機関:

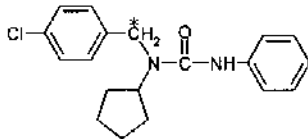
報告年月日: 1993年8月25日

供試化合物:

化学名; 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

クロロベンジル ¹⁴C 標識体

化学構造;



*¹⁴C 標識位置

放射化学的純度;

比放射能;

供試植物: ばれいしょ (品種; clivia)

処理及び試料採取;

種いも 100kg 当り約 20g a.i. で処理した。種いも 6 個 (合計 408g) に少量の水を散布して湿らせた後、12.5%DS 製剤 684.2mg を処理し、1m² 容器に植付けた。植付 132 日後 (収穫期) に茎葉、根、塊茎及び種いもを採取した。

抽出及び分析;

塊茎は少量の水で土壌を取り除いた後、細切及び混合し、アセトン、メタノール、次いでメタノール/水 (1/1) で抽出した。これらの抽出液を合わせて濃縮し、残った水層をジクロロメタン、次いで酢酸エチルで抽出し、ジクロロメタン層、酢酸エチル層及び水層を得た。茎葉及び根はそれぞれ液体窒素中で均質化した後、前述の塊茎と同様に抽出及び分画した。種いもは凍結乾燥後に液体窒素中で均質化し、同様に抽出及び分画した。

塊茎の抽出後の固体残渣はさらにメタノール/水 (1/1) で還流抽出した。抽出液を濃縮後、残った水層を酢酸エチルで抽出した。

各試料中の放射能を液体シンチレーションカウンター (LSC) で測定した。固体試料は、燃焼して放射能測定した。各抽出画分及び水層中の親化合物及び代謝分解物を薄層クロマトグラフィー (TLC) で分析した。

結果:

残留量;

収穫期 (132 日後) の残留量は塊茎で 0.024ppm、茎葉で 0.17ppm、根で 28.54ppm、処理後の種いもで 140.68ppm であった。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表1、残留量 (ppm) 及び抽出・分画後の放射能分布 (総残留量に対する割合%)

	塊茎		茎葉		根		種いも	
	%	ppm	%	ppm	%	ppm	%	ppm
ジクロロメタン層	75.5	0.018	25.5	0.04	77.6	22.14	62.9	88.46
酢酸エチル層	1.9	<0.001	5.2	0.01	17.2	4.92	19.7	27.75
水層	11.7	0.003	36.2	0.06	3.9	1.11	16.3	22.94
メタノール/水還流抽出	4.9	0.001	—	—	—	—	—	—
未抽出画分 ¹⁾	6.0	0.001	33.1	0.06	1.3	0.37	1.1	1.53
合計	100.0	0.024	100.0	0.17	100.0	28.54	100.0	140.68

—: 該当せず。

¹⁾ 茎葉、根、種いもはアセトン、メタノール、メタノール/水抽出後の結果。塊茎はさらに還流抽出した後の結果。

代謝 (塊茎) :

塊茎では、アセトン、メタノール及びメタノール/水に総残留量の89.1% (0.021ppm) が抽出され、ジクロロメタン層に75.5%、酢酸エチル層に1.9%、水層に11.7%分布した。さらに総残留量の4.9%が還流抽出され、6.0%が未抽出であった (表1)。

ジクロロメタン層及び酢酸エチル層には、親化合物 [I] が 40.4% (0.01ppm)、 [X V] の抱合体と推定される成分が 31.9% (0.008ppm)、 [VI] が 0.8% (<0.001ppm)、親化合物 [I] の [VII] 又は [I] が 0.3% (<0.001ppm) 認められた。 [X V] の抱合体と推定される代謝分解物は、単離及び 化後に TLC、HPLC 及び GC/MS 分析して構造推定されたが、0.01ppm 未満と少なく、完全な構造は確定できなかった。また、親化合物 [I] の は 確定できなかった。その他に 1 種類の未同定成分 (代謝物 2) が 0.7%、未同定極性成分 (TLC 原点) が 3.3% 認められた。

水層に認められた放射能 (総残留量の 11.7%) は TLC 原点付近の極性成分と特徴付けられた。極性成分は、ジクロロメタン層と酢酸エチル層も合わせると合計 15.0% に相当したが、さらなる分析はできなかった。還流抽出物には少なくとも 2 種類の成分が認められたが、同定できなかった。

表2、塊茎 (%は、総残留量に対する割合%)

	%	ppm
ジクロロメタン、酢酸エチル、水層	89.1	0.021
親化合物 [I]	40.4	0.010
[VI]	0.8	<0.001
[I] の	0.3	<0.001
[X V] の抱合体	31.9	0.008
未同定成分	0.7	<0.001
未同定極性成分 (TLC 原点)	15.0	0.004
メタノール/水還流抽出	4.9	0.001
未抽出画分	6.0	0.001
合計	100.0	0.024

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

推定代謝経路；

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

7) レタスにおける代謝 (フェニル標識体処理)

(資料 No.13)

試験機関:

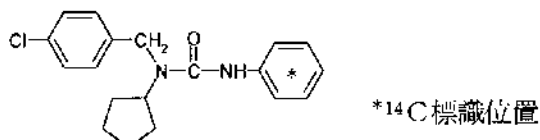
報告年月日: 2003年12月18日

供試化合物:

化学名: 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

フェニル ¹⁴C 標識体

化学構造:



放射化学的純度:

比放射能:

供試植物: レタス (品種: Chagall R2)、温室内で表面積約 0.5m² の容器で栽培した。

処理及び試料採取:

1 回当たり 0.75kg a.i./ha の設定処理量で合計 3 回茎葉散布した (合計 2.25kg a.i./ha)。各処理につき、供試化合物約 42mg (比放射能) を製剤白試料と混合して SC250 製剤 (有効成分約 23%) を調製し、水に溶解して総容量を 50mL として散布した。

播種 35 日後 (本葉 8~12 枚が展開) に 1 回目の処理を行い、その後 10 日間隔で処理した。2 回目処理時のレタス葉球の直径は約 18~20cm、3 回目処理時は約 30~32cm であった。実際の処理量は合計 2.10 kg a.i./ha に相当した。最終散布の 21 日後に地上部を収穫した。

抽出及び分析:

収穫後の試料は液体窒素中で均質化し、アセトニトリル/水 (4/1, v/v)、次いでアセトニトリルで抽出した。これらの抽出液を合わせて濃縮し、残った水層をジクロロメタンで分配してジクロロメタン層と水層に分離した。

抽出及び分画後の各画分中の放射能を液体シンチレーションカウンター (LSC) で測定した。固体試料は風乾後、燃焼して放射能測定した。ジクロロメタン層及び水層中の親化合物及び代謝分解物を高速液体クロマトグラフィー (HPLC) で定量した。HPLC 及び薄層クロマトグラフィー (TLC) での参照化合物との比較、並びに HPLC-MS/MS、NMR 及び FT-MS 分析で同定した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

結果；

最終散布 21 日後の植物地上部における残留量は 18.78ppm であった。大部分の放射能がアセトニトリル/水及びアセトニトリルに抽出され、ジクロロメタン層には総残留量の 95.4% (17.92ppm)、水層には 4.2% (0.79ppm) の放射能が分布した。アセトニトリル抽出後の未抽出画分には総残留量の 0.35% (0.07ppm) の放射能が認められた。

主な残留成分は親化合物 [I] で、ジクロロメタン層と水層を合計すると総残留量の 97.33% (18.28ppm) であった。代謝分解物として [II]、 [IV]、 [VI]、 [XVII]、 [XXI]、 [XXXII]、親化合物 [I] の が認められ、これらの代謝分解物の生成量はいずれも総残留量の 1% 未満であった。親化合物 I の は と推定された。

植物地上部 (%は総残留量に対する割合%)

	%	ppm
ジクロロメタン層	95.4	17.92
親化合物 [I]	93.23	17.51
[VI] ¹⁾	0.51	0.09
[VI]	0.23	0.04
[IV]	0.23	0.04
[XVII]	0.61	0.11
[XXI]	0.20	0.04
[XXXII]	0.27	0.05
[I] の ²⁾	0.16	0.03
水層	4.2	0.79
親化合物 [I]	4.10	0.77
その他	0.11	0.02
未抽出画分	0.35	0.07
合計	100.00	18.78

1)

2)

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

推定代謝経路；

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

8) レタスにおける代謝 (クロロベンジル標識体処理)

(資料 No.14)

試験機関:

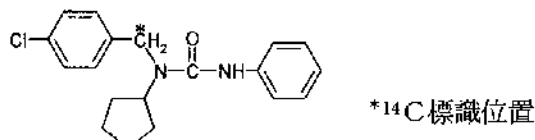
報告年月日: 2003年12月18日

供試化合物:

化学名; 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

クロロベンジル ¹⁴C 標識体

化学構造;



放射化学的純度;

比放射能;

供試植物; レタス (品種; Chagall R2)、温室内で表面積約 0.5m² の容器で栽培した。

処理及び試料採取;

1 回当たり 0.75kg a.i./ha の設定処理量で合計 3 回茎葉散布した (合計 2.25kg a.i./ha)。各処理につき、供試化合物約 41mg (比放射能) を製剤白試料と混合して SC250 製剤 (有効成分約 23%) を調製し、水に溶解して総容量を 50mL として散布した。

播種 35 日後 (本葉 8~12 枚が展開) に 1 回目の処理を行い、その後 10 日間隔で処理した。2 回目処理時のレタス葉球の直径は約 18~20cm、3 回目処理時は約 30~32cm であった。実際の処理量は合計 2.11 kg a.i./ha に相当した。最終散布の 21 日後に地上部を収穫した。

抽出及び分析;

収穫後の試料は液体窒素中で均質化し、アセトニトリル/水 (4/1, v/v)、次いでアセトニトリルで抽出した。これらの抽出液を合わせて濃縮し、残った水層をジクロロメタンで分配してジクロロメタン層と水層に分離した。

抽出及び分画後の各画分中の放射能を液体シンチレーションカウンター (LSC) で測定した。固体試料は風乾後、燃焼して放射能測定した。ジクロロメタン層及び水層中の親化合物及び代謝分解物を高速液体クロマトグラフィー (HPLC) で定量した。HPLC 及び薄層クロマトグラフィー (TLC) での参照化合物との比較、並びに HPLC-MS/MS、NMR 及び FT-MS 分析で同定した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

結果；

最終散布 21 日後の植物地上部における残留量は 19.553ppm であった。大部分の放射能がアセトニトリル/水及びアセトニトリルに抽出され、ジクロロメタン層には総残留量の 99.0% (19.37ppm)、水層には 0.9% (0.17ppm) の放射能が分布した。アセトニトリル抽出後の未抽出画分には総残留量の 0.1% (0.02ppm) の放射能が認められた。

主な残留成分は親化合物[I]で、ジクロロメタン層及び水層を合計すると総残留量の 96.34% (18.837ppm) であった。代謝分解物では [XVI]が最も多く、2.43% (0.474ppm) 検出された。 [II]、 [VI]、 [XX I]、 [XXII]、 [XXIII]、親化合物[I]の が認められ、これらの代謝分解物の生成量はいずれも総残留量の 1%未満であった。親化合物のうち、 と同定された。また、 と推定されたが、 は確定できなかった。

植物地上部 (%は総残留量に対する割合%)

	%	ppm
ジクロロメタン層	<u>99.04</u>	<u>19.365</u>
親化合物[I]	96.10	18.790
[VI] ¹⁾	0.19	0.037
[VI]	0.09	0.017
[XVI]	2.43	0.474
[XX I]	0.11	0.021
[XXII]	0.13	0.025
水層	<u>0.85</u>	<u>0.167</u>
親化合物[I]	0.24	0.047
[XXIII]	0.02	0.004
[VI]	0.17	0.034
[VI]	0.19	0.037
[I]の	0.04	0.009
[I]の	0.02	0.003
その他	0.17	0.033
未抽出画分	<u>0.11</u>	<u>0.022</u>
合計	100.00	19.553

1)

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。
推定代謝経路；

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

3. 土壌中運命試験

1) 好氣的湛水土壌中運命試験及び好氣的土壌中運命試験

(資料No. 15)

試験機関：

報告年月日：1982年3月19日

供試化合物：

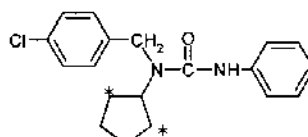
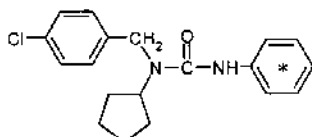
化学名； 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

フェニル ¹⁴C 標識体

シクロペンチル ¹⁴C 標識体

化学構造；

化学構造；



*¹⁴C 標識位置

放射化学的純度；

放射化学的純度；

比放射能；

比放射能；

供試土壌：

好氣的湛水試験には熊谷土壌（非滅菌及び滅菌）及び桶川土壌（非滅菌）、好氣的試験には静岡土壌（非滅菌及び滅菌）を用いた。

	好氣的湛水試験		好氣的試験
	熊谷土壌	桶川土壌	静岡土壌
成因	沖積土壌	火山灰土壌	沖積土壌
土性	軽植土	シルト質壤土	砂壤土
粗砂	5.9	3.2	17.6
組砂	26.2	18.7	52.0
成シルト	37.2	67.5	17.8
粘土	30.7	10.7	12.6
有機物含有量 (%)	2.8	11.6	1.8
陽イオン交換容量 (me/100g)	-	35.9	10.2
pH	6.3	6.7	6.0

試験方法：

200mL 容三角フラスコに土壌 50g（乾土換算）を添加し、好氣的湛水試験では水を加えて水深約 1cm に湛水し、好氣的試験では土壌水分を最大容水量の約 60% に調整した。次いで、供試化合物のアセトン溶液（濃度 200mg/L）を試験容器に 0.5mL 添加した。処理量は 2mg/kg（乾土換算）に相当した。

揮発性物質を捕集するため、トルエン又はメチルセロソルブ/モノエタノールアミン（3/1 v/v）をそれぞれ含む捕集装置を試験容器に接続し、空気を通して、30°C、暗所でインキュベートした。好氣的湛水試験では 90 日間インキュベートし、処理 30 及び 90 日後に土壌を採取した。好氣的試験では 60 日間インキュベートし、処理 20 及び 60 日後に土壌を採取した。揮発性物

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

質捕集液は一定時間後に採取した。

土壤の抽出；

非滅菌土壤については、両試験とも全試料を一次及び二次抽出し、一部の試料（好氣的湛水試験／フェニル標識体処理の全試料及びシクロペンチル標識体処理の90日後の熊谷土壤。好氣的試験／両標識体処理の60日後の試料）を三次抽出した。滅菌土壤は、全試料について一次抽出のみ行った。

一次抽出； 好氣的湛水試験では、吸引ろ過により水層と土壤を分離し、土壤を80%アセトンで1時間（×3回）抽出した後、水層と抽出液を合わせて濃縮した。濃縮後に残った水層は酢酸エチルで抽出して酢酸エチル層と水層に分離した。好氣的試験においても同様に、土壤を80%アセトンで1時間（×3回）抽出した後、抽出液を濃縮し、残った水層を酢酸エチルで抽出した。

二次抽出； 一次抽出後の土壤を1N水酸化ナトリウム/メタノール（2/3 v/v）、次いで1N塩酸/メタノール（2/3 v/v）でそれぞれ2時間抽出した。各抽出液はクロロホルムで抽出してクロロホルム層と水層に分離し、各層をそれぞれ合わせた。

三次抽出； 二次抽出後の土壤を2N水酸化ナトリウム水溶液で24時間抽出した後、吸引ろ過して抽出液と残渣（ヒューミン画分）に分離した。抽出液は6N塩酸でpH2に調整して約2時間放置した後、遠心分離して上澄み液（フルボ酸画分）と沈殿（フミン酸画分）に分離した。上澄み液（フルボ酸画分）を酢酸エチルで2回抽出し、酢酸エチル層と水層に分離した。

分析方法；

液体試料は、液体シンチレーションカクテルに添加して直接液体シンチレーションカウンター（LSC）で放射能測定した。固体試料中の放射能は燃焼してLSCで測定した。

一次抽出後の酢酸エチル層、二次抽出後のクロロホルム層、三次抽出後のフルボ酸画分の酢酸エチル可溶画分について、親化合物及び代謝分解物を薄層クロマトグラフィー（TLC）で定量化した。また、TLCでの標準品との比較及びガスクロマトグラフィー質量分析（GC-MS）により同定した。

試験結果；

1) 好氣的湛水試験（表1及び2）

非滅菌土壤；

両供試土壤において、二酸化炭素の生成量はフェニル標識体処理試料のほうが多かった。また、一次及び二次抽出液中の放射能はシクロペンチル標識体処理試料のほうが多く、二次抽出後の残渣中の放射能はフェニル標識体処理試料のほうが多かった。二酸化炭素の生成量はフェニル標識体処理試料で処理放射能の9.9%（熊谷土壤）及び4.8%（桶川土壤）、シクロペンチル標識体処理試料で2.2%（熊谷土壤）及び0.4%（桶川土壤）であった。二酸化炭素以外の揮発性物質はほとんど認められなかった。

酢酸エチル層及びクロロホルム層を分析した結果、90日後の親化合物[I]の残存率は熊谷土壤で平均約35%、桶川土壤で平均約44%であった（両標識体処理の平均）。主要代謝分解物は

[XV]及び [XVI]で、代謝物XVは90日後に最大14.6%（熊谷土壤）及び2.6%（桶川土壤）、代謝物XVIは90日後に最大22.9%（熊谷土壤）及び34.6%（桶川土壤）検出された。その他に [II]、 [III]、 [IV]、 [V]、 [VI]、 [XIII]、 [XIV]及び [XXI]が認められ

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

たが、これらの代謝分解物の生成量はいずれも処理放射エネルギーの2%未満であった。また、三次抽出後のフルボ酸画分を分析した結果、フェニル標識体処理試料に [XIII] 及び [XVII] がそれぞれ処理放射エネルギーの1%未満検出された。

滅菌土壌；

揮発性物質は検出されなかった。非滅菌土壌と比較すると、滅菌土壌ではより多くの放射能が一次抽出液に回収された。30日後の親化合物の残存率は平均約79%であった（両標識体処理の平均）。 [IV] が平均0.2%（両標識体処理の平均）、 [XV] が1.3%、 [XVI] が4.4%検出された。

2) 好氣的試験（表3及び4）

非滅菌土壌；

二酸化炭素の生成量及び抽出後の各画分への放射能分布は標識位置の違いにより異なり、好氣的湛水試験と同様の傾向が認められた。二酸化炭素の生成量はフェニル標識体処理試料で処理放射エネルギーの25.3%、シクロペンチル標識体処理試料で12.3%であった。二酸化炭素以外の揮発性物質はほとんど認められなかった。

60 日後の親化合物 [I] の残存率は平均約 22%であった（両標識体処理の平均）。主要代謝分解物は [XVI] で、20 日後に 26.4%検出され、60 日後には 16.6%に減少した。 [III] 及び [XV] も比較的多く認められ、それぞれ 60 日後に最大 7.0%及び 5.4% 検出された。その他に好氣的湛水試験で認められた 代謝分解物（II、IV、V、VI、XIII、XIV、XXI）が認められたが、これらの代謝分解物の生成量はいずれも処理放射エネルギーの 5%未満であった。

滅菌土壌；

二酸化炭素の生成量はフェニル標識体処理試料で 1.7%、シクロペンチル標識体処理試料で 0.3%であった。好氣的湛水試験と同様に、非滅菌土壌と比較すると一次抽出液により多くの放射能が回収された。60 日後の親化合物の残存率は平均約 72%であった（両標識体処理の平均）。 [XVI] が 6.7%検出された他、4 種類の代謝分解物（II、III、IV及びXV）が認められたが、これらの代謝分解物の生成量はいずれも処理放射エネルギーの 1%未満であった。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表1、好氣的湛水試験／フェニル標識体処理（処理放射能量に対する割合%）

	非滅菌				滅菌
	熊谷七壤		桶川土壤		熊谷土壤
経過日数	30日	90日	30日	90日	30日
二酸化炭素	5.3	9.9	2.7	4.8	n.d.
一次抽出	65.0	40.4	67.7	46.6	80.4
二次抽出	5.9	11.5	10.8	14.3	—
一次及び二次抽出後の残渣	23.6	35.5	21.8	34.6	18.4
合計	99.8	97.1	103.0	100.3	98.8
一次及び二次抽出 ¹⁾					
酢酸エチル層 + クロホルム層 ¹⁾	66.6	43.8	71.4	50.1	79.4
親化合物 [I] ¹⁾	56.3	36.5	60.3	45.1	78.0
[II] ¹⁾	0.7	0.4	0.8	0.5	n.d.
[IV] ¹⁾	1.0	0.6	0.8	0.5	0.1
[V] ¹⁾	0.7	0.5	0.7	0.2	n.d.
[VI] ¹⁾	0.7	0.3	0.6	0.3	n.d.
[VI] ¹⁾	0.5	0.2	0.4	0.2	n.d.
[XIII] ¹⁾	0.7	0.3	0.3	0.1	n.d.
[XXI] ¹⁾	0.6	0.4	0.3	0.2	n.d.
未同定物質 ¹⁾²⁾	5.4	4.6	7.2	3.0	1.3
水層 ¹⁾	4.3	8.1	7.1	10.8	1.0
三次抽出					
フルボ酸画分	7.3	8.7	5.1	4.4	—
フミン酸画分	9.9	10.1	8.1	10.0	—
ヒューミン画分	6.4	16.5	6.6	20.3	—
フルボ酸画分の分析結果					
酢酸エチル層	1.8	2.8	1.1	1.2	—
[XIII]	0.2	0.7	0.2	0.3	—
[XVIII]	n.d.	0.6	n.d.	0.2	—
未同定物質	1.6	1.5	0.9	0.7	—
水層	5.5	5.9	4.0	3.2	—

n.d. : 検出されず。 — : 該当せず。

¹⁾ 非滅菌土壤については両画分の合量を申請者が算出した。滅菌土壤については一次抽出（酢酸エチル層）のみの結果。

²⁾ 複数の成分（ ）の合計で、申請者が算出した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表2、好氣的湛水試験／シクロペンチル標識体処理（処理放射能に対する割合％）

	非滅菌				滅菌
	熊谷土壌		桶川土壌		熊谷土壌
経過日数	30日	90日	30日	90日	30日
二酸化炭素	0.5	2.2	0.1	0.4	n.d.
一次抽出	81.4	58.4	76.7	57.4	89.9
二次抽出	15.0	26.9	20.8	35.0	—
一次及び二次抽出後の残液	5.4	11.5	2.9	6.5	6.2
合計	102.3	99.0	100.5	99.3	96.1
一次及び二次抽出 ¹⁾					
酢酸エチル層 + クロロホルム層 ¹⁾	93.2	80.7	93.0	84.7	89.3
親化合物 [I] ¹⁾	62.0	33.9	63.7	42.3	79.1
[III] ¹⁾	n.d.	1.2	n.d.	1.1	n.d.
[IV] ¹⁾	0.9	0.7	0.6	0.6	0.3
[V] ¹⁾	0.5	0.8	0.6	0.2	n.d.
[VI] ¹⁾	0.6	0.5	0.5	0.3	n.d.
[VI] ¹⁾	0.6	0.3	0.2	0.2	n.d.
[XIII] ¹⁾	n.d.	0.5	n.d.	n.d.	n.d.
[XV] ¹⁾	10.8	14.6	1.8	2.6	1.3
[XVI] ¹⁾	11.7	22.9	23.4	34.6	4.4
[XXI] ¹⁾	0.5	0.6	0.1	0.1	n.d.
未同定物質 ^{1) 2)}	5.6	4.7	2.1	2.8	4.2
水層 ¹⁾	3.2	4.6	4.5	7.7	0.6
三次抽出					
フルボ酸画分	—	1.9	—	—	—
フミン酸画分	—	0.4	—	—	—
ヒューミン画分	—	9.2	—	—	—
フルボ酸画分の分析結果					
酢酸エチル層	—	0.2	—	—	—
未同定物質	—	0.2	—	—	—
水層	—	1.7	—	—	—

n.d.：検出されず。—：該当せず。

¹⁾ 非滅菌土壌については両画分の含量を申請者が算出した。滅菌土壌については一次抽出（酢酸エチル層）のみの結果。

²⁾ 複数の成分（ ）の合計で、申請者が算出した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表3、好氣的試験／フェニル標識体処理（処理放射エネルギーに対する割合％）

	非滅菌		滅菌	
	静岡土壌		静岡土壌	
経過日数	20日	60日	20日	60日
二酸化炭素	8.2	25.3	0.3	1.7
一次抽出	69.5	30.7	86.7	77.2
二次抽出	11.4	12.5	—	—
一次及び二次抽出後の残渣	12.3	27.7	12.0	19.4
合計	101.4	96.2	99.0	98.3
一次及び二次抽出¹⁾				
酢酸エチル層 + クロロホルム層 ¹⁾	72.5	35.4	—	76.9
親化合物 [I] ¹⁾	46.8	22.0	—	73.7
[II] ¹⁾	2.4	0.5	—	0.1
[IV] ¹⁾	3.9	2.2	—	0.2
[V] ¹⁾	1.2	0.5	—	n.d.
[VI] ¹⁾	0.7	1.3	—	n.d.
[VII] ¹⁾	0.4	0.4	—	n.d.
[XIII] ¹⁾	0.3	0.2	—	n.d.
[XXI] ¹⁾	4.6	2.7	—	n.d.
未同定物質 ^{1) 2)}	12.2	5.6	—	2.9
水層 ¹⁾	8.4	7.8	—	0.3
三次抽出				
フルボ酸画分	—	10.1	—	—
フミン酸画分	—	5.6	—	—
ヒューミン画分	—	13.0	—	—
フルボ酸画分の分析結果				
酢酸エチル層	—	0.8	—	—
[XIII]	—	n.d.	—	—
[XVIII]	—	n.d.	—	—
未同定物質	—	0.8	—	—
水層	—	9.3	—	—

n.d. : 検出されず。 — : 該当せず。

¹⁾ 非滅菌土壌については両画分の含量を申請者が算出した。滅菌土壌については一次抽出（酢酸エチル層）のみの結果。

²⁾ 複数の成分（ ）の合計で、申請者が算出した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表4、好氣的試験／シクロペンチル標識体処理（処理放射エネルギーに対する割合％）

	非滅菌		滅菌	
	静岡土壌		静岡土壌	
経過日数	20日	60日	20日	60日
二酸化炭素	2.1	12.3	n.d.	0.3
一次抽出	60.7	54.6	85.6	79.6
二次抽出	31.5	17.6	—	—
一次及び二次抽出後の残渣	2.9	9.3	16.0	18.8
合計	97.2	93.8	101.6	97.7
<u>一次及び二次抽出¹⁾</u>				
酢酸エチル層 + クロホルム層 ¹⁾	85.4	66.1	—	79.5
親化合物 [I] ¹⁾	43.3	22.8	—	71.2
[III] ¹⁾	1.4	7.0	—	0.1
[IV] ¹⁾	2.8	1.7	—	0.2
[V] ¹⁾	0.9	0.7	—	n.d.
[VI] ¹⁾	0.7	1.5	—	n.d.
[VII] ¹⁾	0.1	0.8	—	n.d.
[XIV] ¹⁾	n.d.	1.7	—	n.d.
[XV] ¹⁾	2.3	5.4	—	0.4
[XVI] ¹⁾	26.4	16.6	—	6.7
[XXI] ¹⁾	2.6	2.7	—	n.d.
未同定物質 ¹⁾²⁾	3.6	5.2	—	0.9
水層 ¹⁾	6.8	6.1	—	0.1
<u>三次抽出</u>				
フルボ酸画分	—	2.2	—	—
フミン酸画分	—	2.7	—	—
ヒューミン画分	—	4.4	—	—
<u>フルボ酸画分の分析結果</u>				
酢酸エチル層	—	0.1	—	—
未同定物質	—	0.1	—	—
水層	—	2.1	—	—

n.d. : 検出されず。 — : 該当せず。

¹⁾ 非滅菌土壌については両画分の含量を申請者が算出した。滅菌土壌については一次抽出（酢酸エチル層）のみの結果。

²⁾ 複数の成分（ ）の合計で、申請者が算出した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

推定半減期；

ペンシクロンの土壌における半減期は、好氣的湛水条件下で約60日、好氣的条件下で20日以内と推定された。

推定代謝経路；

以上の結果から、ペンシクロンの土壌における代謝経路は、好氣的湛水条件と好氣的条件で同様であり、以下のとおり推定された。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

分)と水層に分離した。1N NaOH 水溶液についても、逆の方法で同様に三画分及び水層を得た。抽出液中の親化合物及び分解物を HPLC 及びガスクロマトグラフィー (GC) で定量し、GC 及びガスクロマトグラフィー質量分析 (GC-MS) で同定した。

試験結果：

①加水分解速度

pH6.6 緩衝液、pH8.8 緩衝液、脱イオン水及び水道水 (28°C) において、試験終了時 (62 日後) までに親化合物はほとんど分解せず、安定であった。pH5.0 緩衝液 (28°C) において親化合物は徐々に分解し、半減期は約 76 日と算出された。1N HCl 水溶液及び 1N NaOH 水溶液 (40°C) において親化合物は速やかに分解し、半減期は 1N HCl 水溶液において 48.5 時間、1N NaOH 水溶液において 43.6 時間と算出された。

推定半減期

	半減期
pH5.0 滅菌緩衝液	約76日 (28°C)
pH6.6 滅菌緩衝液	ほとんど分解せず (28°C、62日間)
pH8.8 滅菌緩衝液	ほとんど分解せず (28°C、62日間)
滅菌脱イオン水	ほとんど分解せず (28°C、62日間)
水道水	ほとんど分解せず (28°C、62日間)
1N HCl水溶液	48.5時間 (40°C)
1N NaOH水溶液	43.6時間 (40°C)

②加水分解物の分析

試験終了時 (2日後) の親化合物の残存率は、1N HCl水溶液 (40°C) では処理量の61.85%、1N NaOH 水溶液 (40°C) では61.07%であった。いずれの供試水においても主要分解物は [XVII]で、処理量の約26%検出された。その他には [II]、[IV]、[XV] 及び [XVIII]が同定され、代謝物XVIIIが1N NaOH水溶液中で7.31%、代謝物IVが1N HCl 水溶液中で3.01%認められた他は、いずれも処理量の3%以下であった。

加水分解物の分析結果 (処理量に対する%)

	1N HCl水溶液	1N NaOH 水溶液
親化合物 [I]	61.85	61.07
[II]	0.86	<0.01
[IV]	3.01	0.82
[XV]	2.70	1.18
[XVI]	26.05	25.62
[XVIII]	1.11	7.31
合計 ベンゾル基 (I + II + XV + XVI)	91.46	87.87
シクロペンチル基 (I + IV + XV + XVI)	93.61	88.69
加ホニル基 (I + II + IV + XV)	68.42	63.07
フェニル基 (I + II + IV + XVIII)	66.83	70.38

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

推定分解経路；

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はパイエルクロップサイエンス株式会社にある。

2) 水中光分解運命試験及び土壌表面における光分解試験

(資料No. 16)

試験機関：

報告年月日：1982年3月2日

① 水中光分解運命試験

供試化合物：

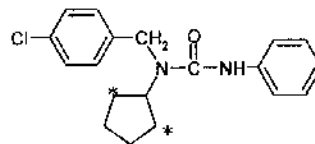
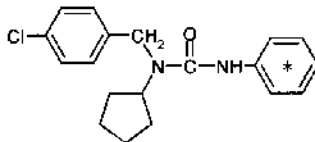
化学名； 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

フェニル¹⁴C標識体

シクロペンチル¹⁴C標識体

化学構造；

化学構造；



*¹⁴C標識位置

放射化学的純度；

放射化学的純度；

比放射能；

比放射能；

供試水：

滅菌蒸留水

滅菌2%アセトン含有蒸留水

滅菌自然水 採取場所；浅川（東京都日野市豊田）、pH7.2

採取場所；荒川（埼玉県和光市）、pH7.5

光照射条件：

光源； 自然太陽光

光強度； 338W/m² (300~3000nm)

(統計値から推定(東京の全天日射量、理科年表平成6年机上版))

試験方法：

500mL容パイレックス製三角フラスコに供試化合物を0.03mg添加し、供試水を150mL添加して濃度0.2mg/Lの試験液を調製した。1981年8月11日から自然太陽光を7日間にわたり1日8時間照射し、照射1、2、4及び7日後に試験液を採取した。ポリウレタンフォーム、エタノール及びメチルセロソルブモノエタノールアミンをそれぞれ含む捕集装置を接続し、揮発性物質を捕集した。比較として暗対照区(25℃)も用意した。

抽出及び分析；

試験液を酢酸エチルで3回抽出し、酢酸エチル層と水層に分離した。各層を液体シンチレーションカウンター(LSC)で放射能測定し、酢酸エチル層中の親化合物及び分解物を薄層クロマトグラフィー(TLC)で分析した。捕集装置のポリウレタンフォームは細切し、メタノールで抽出した。このメタノール抽出

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

液、エタノール捕集液及びメチルセロソルブ/モノエタノールアミン捕集液をそれぞれ放射能測定した。

試験結果：

蒸留水及び2%アセトン含有蒸留水；

照射7日後の2%アセトン含有蒸留水における揮発性物質の生成量は合計22.9%（フェニル標識体処理）及び合計16.2%（シクロベンチル標識体処理）であった。大部分はメチルセロソルブ/エタノールアミン捕集液に回収され、二酸化炭素と推定された。照射4日後の親化合物[I]の残存率は蒸留水で25.5%、2%アセトン含有蒸留水で平均約29%（両標識体処理の平均）であり、アセトン添加による差はほとんど認められなかった。主要分解物として [IV]及び [XVI]が処理放射エネルギーの>10%検出された。また、 [II]も比較的多く、約8%検出された。その他には [III]及び

[XIII]が処理放射エネルギーの<3%検出された他、数種類の未同定物質が認められた。

暗対照区では、4日後のベンシクロンの残存率は平均約67%であった（両標識体処理の平均）。主要分解物は [XVI]及び [XX]で、それぞれ処理放射エネルギーの21.7%及び24.2%検出された。

表1、蒸留水及び2%アセトン含有蒸留水の分析結果（処理放射エネルギーに対する%）

Ph：フェニル標識体処理 Cy：シクロベンチル標識体処理

	照射区									暗対照区											
	蒸留水			2%アセトン含有蒸留水						2%アセトン含有蒸留水											
	Ph		4日	Ph			Cy			Ph	Cy										
	1日	4日		1日	4日	7日	1日	4日	7日	4日	4日										
捕集装置	/																				
ポリウレタンフォーム																				2.1	0.9
エタノール																				1.2	1.4
メチルセロソルブ/エタノールアミン (二酸化炭素)										19.6	13.9										
酢酸エチル層																					
親化合物[I]	81.1	25.5	76.1	31.2	↑	72.2	26.7	↑	63.8	69.5											
[II]	1.4	8.3	1.8	8.1	↑	*	*	↑	n.d	*											
[III]	*	*	*	*	↑	0.2	1.2	↑	*	n.d											
[IV]	6.0	12.7	7.5	17.4	↑	6.8	16.5	↑	n.d	n.d											
[XIII]	n.d	2.6	n.d	2.2	↑	*	*	↑	n.d	*											
[XVI]	*	*	*	*	↑	9.0	15.1	↑	*	21.7											
[XX]	n.d	n.d	n.d	n.d	69.5 ^{D)}	*	*	73.7 ^{D)}	24.2	*											
未同定物質、	0.2	5.9	n.d	4.2	↓	0.2	4.4	↓	n.d	n.d											
未同定物質、	n.d	2.5	n.d	2.5	↓	n.d	0.6	↓	n.d	n.d											
未同定物質、	n.d	0.7	n.d	0.5	↓	0.2	0.4	↓	n.d	n.d											
未同定物質、その他	0.3	0.7	0.3	0.8	↓	0.4	0.2	↓	1.4	3.2											
未同定物質、原点	n.d	1.1	0.2	1.5	↓	1.3	0.2	↓	0.4	1.2											
水層																					
合計	89.0	60.0	86.3	69.3	92.4	90.3	65.3	89.9	89.8	96.0											

n.d：検出されず（<0.1%）。 斜線：報告書に記載なし。

*：供試化合物の標識位置に基づき、該当せず。 D) 試験液中の放射エネルギー。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

自然水；

照射7日後の荒川河川水における揮発性物質の生成量は合計29.4%（フェニル標識体処理）及び合計22.0%（シクロペンチル標識体処理）であり、大部分は二酸化炭素と推定された。揮発性物質の生成量は蒸留水よりも河川水において多く、また、フェニル標識体処理試料のほうがシクロペンチル標識体処理よりも多かった。照射4日後の親化合物[I]の残存率は浅川で4.6%、荒川で平均3.8%（両標識体処理の平均）であった。 [II]、 [III]、 [IV]及び [XVI]が比較的多く認められ、最大で処理放射エネルギーの約5~7%検出された。その他には [XIII]及び数種類の未同定物質が認められた。

暗対照区では、4日後の親化合物の残存率は平均約65%であった（両標識体処理の平均）。主要分解物は [XVI]及び [XX]で、それぞれ処理放射エネルギーの18.1%及び20.7%検出された。

表2、自然水の分析結果（処理放射エネルギーに対する%）

Ph：フェニル標識体処理 Cy：シクロペンチル標識体処理

	照射区							暗対照区		
	浅川		荒川			荒川			Ph	Cy
	Ph	Ph	Cy	Ph	Cy	Ph	Cy			
1日	4日	1日	4日	7日	1日	4日	7日	4日	4日	
捕集装置										
ポリウレタンフォーム					4.7			0.5		
エタノール					0.8			0.6		
メチルセルロース/エタノール/メシ (二酸化炭素)					23.9			20.9		
酢酸セル層										
親化合物[I]	62.3	4.6	63.5	3.9		56.7	3.7		64.2	65.3
[II]	5.2	3.3	5.8	2.9		*	*		n.d	*
[III]	*	*	*	*		2.9	5.2		*	n.d
[IV]	5.9	3.0	5.8	2.7		4.2	2.2		1.2	2.5
[XIII]	0.2	1.7	0.5	1.7		*	*		n.d	*
[XVI]	*	*	*	*		7.1	5.2		*	18.1
[XX]	n.d	n.d	n.d	n.d	51.3 ^{D)}	*	*	64.1 ^{D)}	20.7	*
未同定物質、	1.8	4.5	2.1	4.1		1.6	3.9		n.d	n.d
未同定物質、	0.8	5.3	1.0	4.9		0.9	4.0		n.d	n.d
未同定物質、	0.4	0.9	0.5	0.3		0.7	0.2		n.d	n.d
未同定物質、その他	0.7	4.1	0.9	3.8		0.1	5.3		2.7	4.9
未同定物質、原点	1.5	3.2	2.6	1.3		0.1	1.1		0.2	0.3
水層										
合計	78.8	30.6	82.7	25.6	80.7	74.3	29.2	86.1	89.0	91.1

n.d：検出されず (<0.1%)。 斜線：報告書に記載なし。

*：供試化合物の標識位置に基づき、該当せず。 ^{D)} 試験液中の放射エネルギー。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

推定半減期；

以上の結果から、ペンシクロンの水中光分解半減期は以下のとおり算出された（申請者が算出）。

	標識位置	推定半減期
滅菌蒸留水	フェニル標識体	2日
滅菌2%アセトン含有 蒸留水	フェニル標識体	2.4日
	シクロペンチル標識体	2.1日
滅菌自然水（浅川）	フェニル標識体	1.3日
滅菌自然水（荒川）	フェニル標識体	1.3日
	シクロペンチル標識体	1.1日

推定分解経路；

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

② 土壌表面における光分解運命試験

供試化合物：

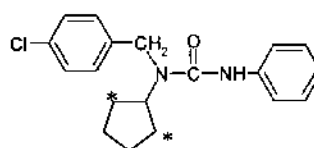
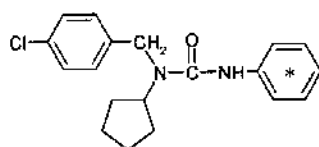
化学名； 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

フェニル¹⁴C標識体

シクロペンチル¹⁴C標識体

化学構造；

化学構造；



*¹⁴C標識位置

放射化学的純度；

放射化学的純度；

比放射能；

比放射能；

供試土壌： 岐阜土壌（鉍質土、有機物質含有量3.3%）

静岡土壌（沖積土、有機物質含有量1.8%）

光照射条件：

光源； 自然太陽光

光強度； 338W/m² (300~3000nm)

(統計値から推定(東京の全天日射量、埋科年表平成6年机上版))

試験方法：

供試土壌を厚さ 0.5mm に塗布したガラス板 (10cm×10cm) 全体に、供試化合物の 50mg/L アセトン溶液 1mL を処理した。処理量はフェニル標識体処理で 0.50 μg/cm²、シクロペンチル標識体処理で 0.48 μg/cm²であった。処理後、ドラフト内で 1 時間放置した後、1981 年 8 月 14 日から自然太陽光を 30 日間 にわたり 1 日 8 時間照射し、照射 2、5、10、20 及び 30 日後に土壌を採取した。比較として暗対照区 (25℃) も用意した。

抽出及び分析；

土壌をアセトンで 3 回抽出した。照射 20 日後試料については、アセトン抽出後の土壌をさらに 0.5N 水酸化ナトリウム/メタノール (2/3 v/v) で抽出後、この抽出液をクロロホルムで抽出してクロロホルム層と水層に分離した。各画分を放射能測定し、アセトン抽出液及び 0.5N 水酸化ナトリウム/メタノール抽出後のクロロホルム層中の親化合物及び代謝分解物を薄層クロマトグラフィー (TLC) 分析した。

試験結果：

照射 30 日後の回収率は処理放射エネルギーの 63.4~77.0% であり、いずれの土壌においてもシクロペンチル標識体処理試料のほうがフェニル標識体処理よりやや速く消失した。暗対照区における 10 日後の回収率は処理放射エネルギーの >97% であった。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表 3、岐阜土壌／抽出後の放射能分布（処理放射エネルギーに対する%）

Ph：フェニル標識体処理 Cy：シクロペンチル標識体処理

	照射区										暗対照区	
	Ph					Cy					Ph	
	2日	5日	10日	20日	30日	2日	5日	10日	20日	30日	5日	10日
70%抽出液	74.6	77.6	39.8	31.6	24.7	65.3	61.3	38.4	23.8	20.9	94.5	86.3
0.5NNaOH/ メタノール抽出液	—	—	—	32.5	—	—	—	—	29.6	—	—	—
未抽出残渣	23.4	23.8	48.7	17.2	44.0	25.6	27.5	36.6	13.8	42.5	6.1	11.2
合計	98.0	101.4	88.5	81.3	68.7	90.9	88.8	75.0	67.2	63.4	100.6	97.5

—：該当せず。

表 4、静岡土壌／抽出後の放射能分布（処理放射エネルギーに対する%）

Ph：フェニル標識体処理 Cy：シクロペンチル標識体処理

	照射区										暗対照区	
	Ph					Cy					Cy	
	2日	5日	10日	20日	30日	2日	5日	10日	20日	30日	5日	10日
70%抽出液	77.1	68.9	39.2	28.3	27.2	72.8	62.0	37.0	23.6	20.5	92.5	86.4
0.5NNaOH/ メタノール抽出液	—	—	—	35.7	—	—	—	—	38.3	—	—	—
未抽出残渣	20.1	25.6	49.1	19.5	49.8	21.0	27.7	48.3	14.5	52.0	9.4	12.4
合計	97.2	94.5	88.3	83.5	77.0	93.8	89.7	85.3	76.4	72.5	101.9	98.8

—：該当せず。

照射区（岐阜土壌）において、親化合物【I】の残存率は2日後に平均約23%、5日後に平均約19%、20日後に平均約6%であった（両標識体処理の平均）。主要代謝分解物は【II】、【IV】及び

【XVI】で、代謝物IIは5日後に最大13.3%、代謝物IVは20日後に最大約11%（両標識体処理の平均）、代謝物XVIは2日後に最大15.1%検出された。【XIII】も比較的多く認められ、20日後に最大8.1%検出された。その他には【III】及び【XV】が同定された。また、複数の未同定物質が認められ、TLCでの比較検討によりは水溶液中に認められたと、はと同じ代謝分解物と推定された。

暗対照区において、10日後の親化合物の残存率は岐阜土壌で61.3%、静岡土壌で59.2%であった。主要代謝分解物は【XVI】で5日後に最大17.7%検出された。【XV】が10日後に最大7.4%検出された他、【II】、【III】、【IV】、【XIII】がそれぞれ処理放射エネルギーの<5%検出された。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

表 5、代謝分解物の分析結果 (処理放射エネルギーに対する%)

Ph : フェニル標識体処理 Cy : シクロペンチル標識体処理

	照射区						暗対照区			
	岐阜土壌						岐阜土壌		静岡土壌	
	Ph			Cy			Ph		Cy	
	2日	5日	20日	2日	5日	20日	5日	10日	5日	10日
アセトン抽出液+クロロホルム層 ¹⁾										
親化合物 [I]	25.9	19.1	5.5	20.2	18.5	5.9	72.7	61.3	63.3	59.2
[II]	8.9	13.3	8.8	*	*	*	3.2	4.1	*	*
[III]	*	*	*	1.1	1.8	2.3	*	*	n.d.	0.5
[IV]	8.8	10.0	10.0	8.6	8.2	11.9	4.9	4.7	4.4	3.8
[X III]	1.8	2.6	8.1	*	*	*	0.4	0.4	*	*
[XV]	*	*	*	1.4	1.2	n.d.	*	*	0.3	7.4
[XVI]	*	*	*	15.1	11.5	10.6	*	*	17.7	14.2
未同定物質、	2.8	1.3	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
未同定物質、	2.2	2.1	2.5	1.5	1.0	2.2	} 4.8 }	} 4.2 }	} 1.2 }	} 0.9 }
未同定物質、	6.4	9.6	2.9	5.6	6.6	2.8				
未同定物質、	3.8	4.0	3.4	3.1	2.4	2.3	n.d.	1.3	n.d.	n.d.
未同定物質、	1.7	1.7	1.0	1.0	1.6	0.4	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
未同定物質、	1.9	2.4	1.3	1.7	2.5	1.3	n.d.	0.8	n.d.	n.d.
未同定物質、	0.5	0.6	1.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
未同定物質、原点	6.9	5.3	0.8	3.4	2.7	0.4	4.3	4.6	2.3	1.1
未同定物質、その他	3.0	5.6	5.5	2.6	1.5	4.5	4.2	4.9	3.3	0.2
水層	—	—	12.9	—	—	8.5	—	—	—	—
合計 ¹⁾	74.6	77.6	63.7	65.3	61.3	53.1	94.5	86.3	92.5	86.4

n.d. : 検出されず (<0.1%)。 — : 該当せず。 * : 供試化合物の標識位置に基づき、該当せず。

¹⁾ 20日後(照射区)の結果はアセトン抽出液及びクロロホルム層の分析結果の含量で、申請者が算出した。他はアセトン抽出液の結果。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はパイエルクロップサイエンス株式会社にある。

推定半減期；

ベンシクロンの土壌表面における光分解半減期は2日以内と推定された。

推定代謝経路；

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

5. 土壌吸着性試験

(資料No. 18)

試験機関：

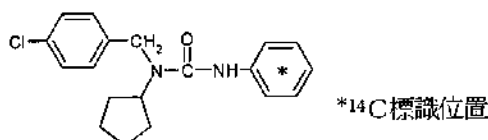
報告年月日：1982年3月12日

供試化合物：

化学名： 1-(4-クロロベンジル)-1-シクロペンチル-3-フェニル尿素

フェニル¹⁴C標識体

化学構造：



放射化学的純度；

比放射能；

供試土壌：

用いた4種類の土壌の特性を以下に示す。

	桶川土壌	熊谷土壌	水戸土壌	静岡土壌	
成因	火山灰土壌	沖積土壌	火山灰土壌	沖積土壌	
土性	シルト質壤土	軽埴土	軽埴土	シルト質埴壤土	
組成	粗砂	3.2	5.9	3.2	3.2
	砂	18.7	26.2	43.8	23.1
	シルト	67.5	37.2	26.5	50.9
	粘土	10.7	30.7	26.3	22.7
有機物含有量 (%)	11.6	2.8	6.4	3.6	

1) 平衡化時間の測定

方法：

熊谷土壌及び水戸土壌を用いた。50mL容遠沈管に土壌2.5gを量りとり、供試化合物の0.1mg/L水溶液を5mL添加し、30℃で振とうした。一定時間後、25℃で10分間遠心分離して上澄み液を採取し、水溶液中の放射能濃度を液体シンチレーションカウンター(LSC)で測定した。

結果：

水溶液中の放射能濃度は、10分後には熊谷土壌で約30%、水戸土壌で約10%まで減少した。2時間後以降はほぼ一定値(熊谷土壌で約4%、水戸土壌で約2%)を示すようになり、ほぼ2時間後から平衡に達したと推定された。これらの結果から、吸着試験の振とう時間を4時間に設定した。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

2) 吸着試験

方法：

蒸留水を用い、4 濃度 (設定濃度 0.05、0.1、0.2 及び 0.3mg/L) の供試化合物水溶液を調製した。50mL 容遠沈管に土壌 2.5g を量りとり、供試化合物水溶液 5mL を各遠沈管に添加し、30°C又は 50°Cで 4 時間振とうして平衡化した。振とう後、25°Cで 10 分間遠心分離して上澄み液を採取し、LSC で放射能測定した。

また、pH4.0 緩衝液 (酢酸 0.2M 溶液/酢酸ナトリウム 0.2M 溶液 (41/9)) 又は pH9.9 緩衝液 (グリシン 0.2M 溶液/水酸化ナトリウム 0.2M 溶液 (50/32)) を用い、前述と同様に 4 濃度の供試化合物水溶液を調製し、温度 30°Cで同様に吸着試験を行った。

結果：

蒸留水 (30°C) においてペンシクロンの吸着係数 (K_{rad}) は 43.2~264、有機炭素吸着係数 ($K_{rad,oc}$) は 2256~3918 であり、ペンシクロンは土壌中で移行しにくいと推定された。酸性溶液を用いたほうが吸着係数が大きく、吸着されやすい傾向が認められた。

表 1、吸着係数

	蒸留水 (pH6.8) (30°C)	pH4.0 緩衝液 (30°C)	pH9.9 緩衝液 (30°C)	蒸留水 (pH6.8) (50°C)
桶川土壌	264	297	165	241
熊谷土壌	43.2	105	56.5	37.5
水戸土壌	83.8	146	54.4	72.2
静岡土壌	64.5	122	52.0	58.5

表 2、蒸留水 (30°C) における有機炭素吸着係数

	oc %	$K_{rad,oc}$
桶川土壌	6.7	3918
熊谷土壌	1.6	2660
水戸土壌	3.7	2256
静岡土壌	2.1	3089

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

6. 生物濃縮性に関する試験
魚類濃縮性試験

(資料 No. 19)

試験機関：
報告書作成年：1982年

被験物質：ペンシクロン原体（純度 99%）

供試生物：コイ (*Cyprinus carpio*)、
1群 20匹、体重：平均 40g

試験方法：水温 25±2°C、被験物質濃度 0.1ppm の連続流水式水槽で 28 日間コイに暴露し、その後 14 日間回復（排泄）期間を設けた。無処理対照群も設けた。

被験物質を所定量秤量し、硬化ヒマシ油 HC0100 とジオクチルフタレートを加えてよく混合した後、脱塩素水を加えて 10L として、20ppm 原液を調製した。調製した原液を 3mL/分で試験水槽に注入し、曝気した脱塩素水を 600mL/分でローラーポンプで流入して、混合して所定濃度の試験水とした。

試験期間中、試験水については、一週間毎に pH 及び溶存酸素 (D.O) を測定した。また、曝露期間中 2 日毎に試験水中のペンシクロンの濃度を分析した。

暴露後 3、7、14、21 及び 28 日、排泄期間 3、7 及び 14 日後に 2 匹ずつ採取して魚体の分析を実施した。

結果：

(1) 観察

試験期間中は対照群も含めて、死亡、体色の変化、背曲がり、鰓ぶたの開閉及び餌への寄りつき程度など一般状態に異常は認められなかった。

(2) 環境条件

試験期間中の試験水は、pH 6.5~6.7、D.O 6.0~6.3ppm であった。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

(3) 魚体内の被験物質濃度 (ppm)

試験区 (ppm)	取込期間 (日)					排泄期間 (日)		
	3	7	14	21	28	3	7	14
0.1	11.6	14.5	15.4	16.1	6.71	0.59	<0.01	<0.01
	8.00	11.6	10.8	9.41	19.0	1.51	<0.01	<0.01

数値は1匹ずつの被験物質濃度

魚体中のペンシクロン濃度は供試した2匹間でやや相違はあったが、2匹の平均は曝露3日後で約10ppm、7日後で13ppm検出された後、ほぼ平衡に達し、曝露終了の28日まで増加は見られなかった。曝露終了後、真水に戻すと、魚体中のペンシクロンは速やかに排泄され、3日後には曝露期間中の1/10になり、7日後には検出されなくなった。

(4) 試験水中の被験物質濃度 (ppm)

試験区 (ppm)	取込期間 (日)					排泄期間 (日)		
	3	7	14	21	28	3	7	14
0.1	0.085	0.085	0.083	0.084	0.084	-	-	-

試験水中のペンシクロン濃度は、設定値の80%以上が回収され、28日間の平均濃度は0.084ppmであった。

(5) 濃縮係数

BCF_{ss}

BCF _{ss}	取込期間 (日)				
	3	7	14	21	28
個体別値	136	171	186	192	80
	94	136	130	112	226
平均値	115	154	158	152	153

[申請者注]:定常状態にあると考えられる7~28日の濃縮係数の平均値は154である。

(6) 脂質含量

供試魚の脂質含量は、Bligh と Dyer¹⁾の方法の改良法(山本の方法²⁾)で測定した結果、4.0%であった。

¹⁾E. G. Bligh & W. J. Dyer : A rapid method of total lipid extraction and purification, Can. J. Biochem. & Physiol., 37, 911 (1959)

²⁾T. Yamamoto: Test Guideline for the determination of the total lipid content of fish, on OECD Chemical Testing Program received by Chemical Biotesting Center, Japan

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はパイエルクロップサイエンス株式会社にある。

代謝分解のまとめ

[動物体内運命試験]

^{14}C 標識ペンシクロン (フェニル標識、カルボニル標識、シクロペンチル標識及びクロロベンジル標識)を用いて、ラット及びマウスにおけるペンシクロンの動物体内運命を検討した。

臓器・組織中濃度

雌雄ラットにおいて、各臓器・組織中濃度は投与 3 時間後までに最高濃度に達し、肝臓で最も高く、腎臓、肺、副腎、脂肪で比較的高かった。雄マウスの各臓器・組織中濃度は投与 2 又は 8 時間後までに最高濃度に達し、胆嚢で最も高く、肝臓、腎臓、副腎、脂肪で比較的高かった。

全身オートラジオグラフィの結果、投与放射能は全身に分布し、肝臓、腎臓及びハーダー腺に比較的多く分布した。

以上の試験において、いずれの臓器・組織においても蓄積は認められなかった。

排泄

排泄パターンに標識位置による差及び雌雄差は認められなかった。投与放射能は速やかに排泄され、尿中よりも糞中に多く排泄された。また、呼気への排泄はわずかであり、投与量の 0.5%未満であった。

代謝

フェニル標識体及びカルボニル標識体をラットに経口投与した試験では、親化合物は糞中に多く(12.4-16.9%)、主要代謝物として [VII]が認められ(糞中で 7.0-9.2%、尿中で 12.1-13.4%)、その他に [II]、 [V]、 [VII]が同定され、いずれも 5%未満であった。また、 [X]、 [XI]及び [XII]も認められた。

シクロペンチル標識体を用いたラットの試験では、経口投与した場合には糞中で親化合物が 26.0-64.1%、主要な代謝物として[VII]が 5.0~10.7%認められ、その他に[V]、 [VI]、 [X]も認められ、尿中でも同様の傾向であった。静脈注射投与した場合には、親化合物はほとんど認められず、糞中には[VII]及び[V]が比較的多く認められ、尿中には[VII]が最も多く認められた。

クロロベンジル標識体をラットに経口投与した場合には、糞中では親化合物が 35.4-77.9%認められ、代謝物では [XVI]が比較的多い他、[VII]、[V]、[VIII]も認められた。尿中には [XXIV]、[VII]及び [XXV]及び[V]の が同定された。

[植物体内運命試験]

^{14}C 標識ペンシクロン (フェニル標識、クロロベンジル標識及びシクロペンチル標識)を用いて、植物体におけるペンシクロンの運命を検討した。供試植物は稲、ばれいしよ、レタスの 3 種である。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

浸透・移行

稲の葉面にフェニル標識体を塗布したところ、処理 40 日後では処理放射能の 57.2%が表面洗浄、30.3%が洗浄後の葉に存在した。洗浄後の葉に認められた放射能は主に塗布部に存在したが、上部及び下部にも放射能は認められた。

代謝

フェニル標識体を稲の葉面に塗布したところ、代謝分解物として [II]、[IV]、[VI]が認められたが、いずれも 1%未満であった。また、酵素処理の結果、[VI]の存在が示唆された。

フェニル標識体を稲に散布したところ、親化合物は玄米で 0.018 ppm、白米で 0.003ppm 検出された。糠を酸又はアルカリ加水分解すると、[XVII]が認められたことから、親化合物に近い代謝分解物又は は生体部分と結合して存在する可能性が示唆された。

クロロベンジル標識体を稲に散布したところ、茎葉、脱穀後の穂及び籾のいずれにおいても回収放射能の 85%以上は親化合物であった。茎葉では[II]も同定されたが、その生成量は回収放射能の 0.2%以下であった。

レタスにおいては、総残留量の大部分は親化合物であった(>96%)。クロロベンジル標識体の処理で [XVI]が 2.43%検出されたが、その他に検出された代謝物の[II]、[IV]、[VI]、[XVII]、[XXI]、[XXII]、[XXIII]、[VI]の、親化合物のはいずれも 1%未満であった。

ばれいしょにおける親化合物の回収率は、稲及びレタスとは異なり低かった（フェニル標識及びシクロペンチル標識で 6.4-8.5%、クロロベンジル標識で 40.4%）。残留放射能の多くはデンプン及びグルコースとして回収され、処理放射能はデンプンを構成するグルコース分子に取り込まれたと考えられた。代謝物として [XVI]、[XV]の、[VI]、親化合物の [VII]又は が認められたが、いずれも回収放射能の 1%未満であった。

[土壌中運命試験]

¹⁴C 標識ペンシクロン（フェニル標識及びシクロペンチル標識）を用いて、土壌中におけるペンシクロンの運命を検討した。

好氣的湛水条件

ペンシクロンは好氣的湛水条件下で比較的速やかに分解し、90 日後の親化合物の残存率は 35-44%であった。二酸化炭素の生成量はフェニル標識で 4.8-9.9%、シクロペンチル標識で 0.4-2.2%であった。10%を超えて生成した主要代謝分解物は、[XV]及び [XVI]であった。その他に [II]、[III]、[IV]、[V] [VI]、[XIII]、[XIV]及び [XXI]が認められたが、これらの生成はいずれも 2%未満であった。また、[XIII]及び [XVII]が 1%未満検出された。

好気条件

ペンシクロンは好氣的湛水条件下で速やかに分解し、60 日後の親化合物の残存率は 22%であった。主要代謝分解物は[XVI]で 20 日後に 26.4%検出され、他に[III]が 7.0%、[XV]が 5.4% 検出された。その他には好氣的湛水条件で認められた 7種類の代謝分解物([II]、[IV]、[V]、[VI]、

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

[Ⅶ]、[XⅢ]、[XⅣ]、[XⅩⅠ])も認められたが、これらの生成量はいずれも処理放射能の5%未満であった。

[加水分解運命試験]

非標識ペンシクロンを用いて、水中におけるペンシクロンの運命を検討した。

半減期

28℃での半減期は、pH 5.0 滅菌緩衝液で約 76 日であったが、pH 6.6 滅菌緩衝液、pH 8.8 滅菌緩衝液、滅菌脱イオン水及び水道水では試験期間中の 62 日間でほとんど分解しなかった。40℃での半減期は、1N HCl 水溶液で 48.5 時間、1N NaOH 水溶液で 43.6 時間であった。

代謝

1N HCl 水溶液、1N NaOH 水溶液を用いて 40℃で 2 日間試験した。いずれの水溶液においても主要分解物は [XⅥ]で、処理量の 26%検出された。その他には [Ⅱ]、[Ⅳ]、[XⅤ]及び [XⅧ]が同定され、[XⅧ]が 1N NaOH 水溶液中で 7.31%、[Ⅳ]が 1N HCl 水溶液中で 3.01%認められた以外は、いずれも処理量の 3%以下の生成量であった。

[水中光分解運命試験]

¹⁴C 標識ペンシクロン (フェニル標識及びシクロペンチル標識)を用いて、滅菌蒸留水、滅菌 2%アセトン含有蒸留水、滅菌自然水におけるペンシクロンの水中光分解運命について検討した。また、土壌表面における光分解についても検討した。

半減期

蒸留水で 2 日、2%アセトン含有蒸留水で 2.3 日、自然水で 1.3 日及び 1.2 日であった。

代謝

蒸留水及び 2%アセトン含有蒸留水

揮発性物質の生成量は 7 日間で 16.2-22.9%であった。主要分解物として、[Ⅳ]及び [XⅥ]が処理放射能の 10%以上生成した。その他に [Ⅱ]、[Ⅲ]及び [XⅢ]も検出された。

自然水

揮発性物質の生成量は 7 日間で 22.0-29.4%であった。[Ⅱ]、[Ⅲ]、[Ⅳ]及び[XⅥ]が最大で 5-7%生成した。その他に[XⅢ]も検出された。

土壌表面における光分解

半減期は 2 日以内であった。

主要代謝分解物は[XⅥ]が 15.1%、[Ⅱ]が 13.3%及び[Ⅳ]が 11%それぞれ認められた。その他に[XⅢ]、[Ⅲ]及び [XⅤ]が同定された。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

【土壌吸着試験】

2種の火山灰土壌(シルト質壤土、軽埴土)及び2種の非火山灰土壌(軽埴土、シルト質埴壤土)を用いて土壌吸着試験を行った。30℃での吸着平衡時の吸着係数(K_F)は43.2-264、有機炭素含有率による補正值(K_{Foc})は2256-3918であり、ペンシクロンは土壌中で移行しにくいと推定された。

【生物濃縮性に関する試験】

水温 $25 \pm 2^\circ\text{C}$ 、試験濃度 0.1ppm、流水式で28日間コイに暴露後、14日間回復(排泄)期間を設けた。魚体中のペンシクロン濃度は曝露7日後以降ほぼ平衡に達し、定常状態にあると考えられる7~28日の濃縮係数の平均値からBCF_{ss}は154と計算された。また、曝露終了後真水に戻すと魚体中のペンシクロンは速やかに排出され、7日後には検出されなくなった。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

ペンシクロロンの動植物等における代謝分解経路図

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルタロップサイエンス株式会社にある。

代謝分解の概要

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクログロブサイエンス株式会社にある。

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任はバイエルクロップサイエンス株式会社にある。

附 ペンシタロンの開発年表

