

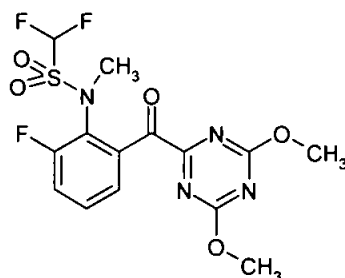
(2) 加水分解動態試験 ( 標識)

(資料：代-12)

[GLP]

報告書作成年： 2012年

供試化合物： [ <sup>14</sup>C]標識トリアファモン  
構造式



\* : <sup>14</sup>C 標識位置

化学名： 2'-[(4,6-ジメチル-1,3,5-トリアジン-2-イル)カルボニル]-  
-1,1,6'-トリフルオロ-N-メチルメタンсульホニアリド

放射化学的純度：

化学的純度：

比放射能量：

供試緩衝液： 用いた緩衝液の pH 及び調製方法を以下に記載した。

| pH | 濃度及び種類    | 調製方法   |
|----|-----------|--|
| 4  | 0.01M 酢酸  | CH <sub>3</sub> COONa×3H <sub>2</sub> O 1.36g を水 250mL に溶解し、酢酸を用いて pH4 に調整し、0.04M 濃度を調製する。これを純水を用いて 4 倍希釈し、0.01M とする。  |
| 7  | 0.01M トリス | トリス(ヒドロキシメチル)-アミノメタン 0.30g を 0.1N 塩酸水溶液 11.65 mL に溶解した後、純水を用いて 250mL に希釈する。この溶液を 0.1N 塩酸水溶液あるいは 0.1N 水酸化ナトリウム溶液を用いて pH7 に調整する。   |
| 9  | 0.01M ホウ酸 | ホウ酸 0.62g 及び KCl 0.75g を水 250mL に溶解する。この溶液 125mL と 0.04N 水酸化ナトリウム水溶液 53mL を合わせ、水で希釈して 250mL とする。0.4N 水酸化ナトリウム水溶液あるいはホウ酸を用いて pH9 に調整し、0.02M 溶液を調製する。これを純水を用いて 2 倍希釈し、0.01M とする。 |

【方法】

[ <sup>14</sup>C]標識トリアファモンをアセトニトリル 25mL に溶解し、名目 4.29MBq/mL (0.96 mg/mL) の溶液を調製し、この 104 μL を各 pH の緩衝液を用いて 100mL

に定容し、約 1.0  $\mu$ g/mL の試験溶液を調製した。

この処理溶液 5mL を 10mL 容のガラスバイアルに入れ (2 反復)、テフロンセプタムを用いて栓をし、各実験温度に保たれたウォーターバスに入れ、暗黒下に試験した。

各試験溶液を以下の間隔で採取した。各採取時期に、pH の確認及び滅菌性の確認を行った。揮発性物質の捕集は行わなかった。

|      |                |                            |
|------|----------------|----------------------------|
| 試験濃度 | 名目 :           | 1.0 mg/L                   |
|      | 実測 :           | 1.0~1.1mg/L                |
| 試験温度 | 試験 1 :         | 50°C                       |
|      | 試験 2 :         | 25°C                       |
|      | 試験 3 :         | 20°C                       |
| 試験期間 | 試験 1 (予備試験) :  | pH4 7 日間、pH7 9 日間、pH9 6 時間 |
|      | 試験 2 (主試験) :   | pH4、pH7、pH9 各 30 日間        |
|      | 試験 3 (追加試験) :  | pH7 及び pH9 各 30 日間         |
| 補助溶媒 | アセトニトリル、約 0.1% |                            |

#### 試料採取間隔

|                       | pH4                       | pH7                       | pH9                                   |
|-----------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------------------|
| 試験 1<br>(予備試験、50°C) : | 0, 2, 4, 7 日              | 0, 1, 2, 3, 4, 7, 9 日     | 0, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 6 時間       |
| 試験 2<br>(主試験、25°C) :  | 0, 3, 6, 10, 14, 22, 30 日 | 0, 3, 6, 10, 14, 22, 30 日 | 0, 0.25, 1, 2, 3, 6, 10, 14, 22, 30 日 |
| 試験 3<br>(追加試験、20°C) : | -                         | 0, 3, 6, 10, 14, 22, 30 日 | 0, 0.25, 1, 2, 3, 6, 10, 14, 22, 30 日 |

採取した試料は 100  $\mu$ L を 3 反復で LSC 測定し放射エネルギーを求め、500  $\mu$ L を直接 HPLC を用いて分析した。pH9 試料は pH7 トリス緩衝液を用いて 2 倍に希釈後 HPLC 分析を行った。定量分析は逆相 HPLC の放射能検出で行い、加えて代表試料は順相 TLC を用いて分析し確認した。

被験物質及び分解物の同定には HPLC-MS、HPLC-MS/MS 及び  $^1$ H-NMR を用いた。

#### 【結果】

##### 1) 分布及び分解物

各試料における放射能回収率は 97.0~103.5%であった。揮発による放射能の損失は無かった。トリアファモンは酸性条件下では安定であったが、アルカリ性条件下では分解し、複数の分解物が生成し、主要分解物は  であった。は試験終了時に向けて増加傾向を示した。

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1 50°C、各 pH におけるトリアファモン、分解物の経時変化 (処理量に対する%)

試験 1

| 50°C pH4    | 採取    |      |       |       |
|-------------|-------|------|-------|-------|
|             | 0 日   | 2 日  | 4 日   | 7 日   |
| トリアファモン [I] | 99.0  | 97.2 | 95.7  | 91.6  |
| 拡散した放射能     | n. d. | 1.9  | 5.1   | 9.7   |
| 総回収率        | 99.0  | 99.1 | 100.8 | 101.3 |

| 50°C pH7    | 採取   |       |      |      |      |      |      |
|-------------|------|-------|------|------|------|------|------|
|             | 0 日  | 1 日   | 2 日  | 3 日  | 4 日  | 7 日  | 9 日  |
| トリアファモン [I] | 99.0 | 89.7  | 73.8 | 63.5 | 55.4 | 32.3 | 24.2 |
| 拡散した放射能     | <LOD | 2.2   | 6.2  | 10.5 | 15.1 | 31.0 | 38.6 |
| 総回収率        | 99.0 | 102.1 | 97.6 | 97.5 | 99.5 | 99.0 | 99.0 |

| 50°C pH9    | 採取    |       |        |       |        |       |        |       |
|-------------|-------|-------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|
|             | 0 時間  | 1 時間  | 1.5 時間 | 2 時間  | 2.5 時間 | 3 時間  | 3.5 時間 | 6 時間  |
| トリアファモン [I] | 99.0  | 71.1  | 59.9   | 51.2  | 42.8   | 36.3  | 30.2   | 12.1  |
| 拡散した放射能     | n. d. | n. d. | <LOD   | <LOD  | <LOD   | <LOD  | 0.4    | 1.7   |
| 総回収率        | 99.0  | 100.4 | 102.2  | 103.5 | 102.9  | 102.7 | 101.0  | 101.5 |

n. d. : 未検出。LOD : 検出限界 (0.4% TAR 以下)。定量限界未満の値であるため、表中に数値は示さない。LOD と LOQ の間の値は、表に示し計算にも用いた。LOQ は LOD の 3 倍 (=1.2% TAR) に設定した。

表2 25℃、各 pH におけるトリアファモン、分解物の分布 (処理量に対する%)

試験 2

| 25℃ pH4     | 採取日   |      |      |      |       |      |      |
|-------------|-------|------|------|------|-------|------|------|
|             | 0日    | 3日   | 6日   | 10日  | 14日   | 22日  | 30日  |
| トリアファモン [I] | 100.2 | 99.1 | 98.8 | 98.8 | 100.1 | 96.1 | 94.8 |
| 拡散した放射能     | n. d. | 0.5  | <LOD | 1.0  | 1.2   | 2.7  | 3.6  |
| 総回収率        | 100.2 | 99.5 | 98.8 | 99.7 | 101.3 | 98.8 | 98.4 |

| 25℃ pH7     | 採取日   |      |      |      |      |      |      |
|-------------|-------|------|------|------|------|------|------|
|             | 0日    | 3日   | 6日   | 10日  | 14日  | 22日  | 30日  |
| トリアファモン [I] | 100.9 | 97.9 | 96.9 | 96.1 | 93.4 | 90.9 | 87.4 |
| 拡散した放射能     | n. d. | <LOD | <LOD | <LOD | 1.0  | 2.1  | 4.4  |
| 総回収率        | 100.9 | 98.9 | 98.8 | 99.3 | 98.7 | 99.0 | 99.7 |

| 25℃ pH9     | 採取日   |       |      |      |      |      |      |      |      |      |
|-------------|-------|-------|------|------|------|------|------|------|------|------|
|             | 0日    | 0.25日 | 1日   | 2日   | 3日   | 6日   | 10日  | 14日  | 22日  | 30日  |
| トリアファモン [I] | 98.7  | 90.7  | 73.2 | 54.0 | 41.8 | 16.5 | 8.0  | 5.1  | 0.9  | 3.4  |
| 拡散した放射能     | n. d. | <LOD  | <LOD | <LOD | <LOD | 1.1  | 2.4  | 4.2  | 7.9  | 11.1 |
| 総回収率        | 98.7  | 98.9  | 98.8 | 98.1 | 99.2 | 98.3 | 97.1 | 97.0 | 97.2 | 97.0 |

n. d. : 未検出。LOD : 検出限界 (0.4%TAR 以下)。定量限界未満の値であるため、表中に数値は示さない。LOD と LOQ の間の値は、表に示し計算にも用いた。LOQ は LOD の 3 倍 (=1.2%TAR) 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

表3 20℃、各 pH におけるトリアファモン、分解物の分布 (処理量に対する%)

試験3

| 20℃ pH7     | 採取日   |      |      |       |       |      |       |
|-------------|-------|------|------|-------|-------|------|-------|
|             | 0日    | 3日   | 6日   | 10日   | 14日   | 22日  | 30日   |
| トリアファモン [I] | 100.3 | 97.8 | 97.1 | 97.7  | 96.7  | 94.1 | 92.5  |
| 拡散した放射能     | n. d. | 0.9  | <LOD | <LOD  | 0.5   | 1.5  | 2.7   |
| 総回収率        | 100.3 | 99.4 | 98.7 | 100.0 | 100.0 | 99.8 | 101.7 |

| 20℃ pH9     | 採取日   |       |      |       |      |      |      |      |      |      |
|-------------|-------|-------|------|-------|------|------|------|------|------|------|
|             | 0日    | 0.25日 | 1日   | 2日    | 3日   | 6日   | 10日  | 14日  | 22日  | 30日  |
| トリアファモン [I] | 99.8  | 94.3  | 83.3 | 72.7  | 62.8 | 38.9 | 21.3 | 13.4 | 5.6  | 2.4  |
| 拡散した放射能     | n. d. | <LOD  | 0.6  | <LOD  | <LOD | 0.5  | 1.7  | 2.8  | 4.5  | 7.1  |
| 総回収率        | 100.3 | 99.7  | 99.9 | 100.4 | 99.9 | 99.6 | 99.4 | 99.2 | 98.3 | 99.3 |

n. d. : 未検出。LOD : 検出限界 (0.4%TAR 以下)。定量限界未満の値であるため、表中に数値は示さない。LOD と LOQ の間の値は、表に示し計算にも用いた。LOQ は LOD の 3 倍 (=1.2%TAR) に設定した。

2) 推定半減期

トリアファモンのDT<sub>50</sub>及びDT<sub>90</sub>を1次速度式にしたがって求めた。推定半減期はpH4で63.8日(50°C)、411日(25°C)、pH7で4.4日(50°C)、153日(25°C)、280日(20°C)であり、pH9では2.1時間(50°C)、2.4日(25°C)、4.6日(20°C)であった。トリアファモンの加水分解は温度及びpHに依存していることが確認された。

表4 トリアファモンの加水分解におけるDT<sub>50</sub>及びDT<sub>90</sub>

| 温度    | pH | DT <sub>50</sub> [日] | DT <sub>90</sub> [日] |
|-------|----|----------------------|----------------------|
| 50° C | 4  | 63.8                 | 212                  |
|       | 7  | 4.4                  | 14.7                 |
|       | 9  | 2.1 時間               | 6.8 時間               |
| 25° C | 4  | 411                  | >1000                |
|       | 7  | 153                  | 508                  |
|       | 9  | 2.4                  | 8.0                  |
| 20° C | 7  | 280.                 | 932                  |
|       | 9  | 4.6                  | 15.3                 |

図1 <sup>14</sup>C-トリアファモンの推定加水分解経路

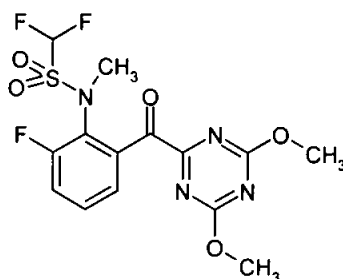
(3) 水中光分解動態試験 (滅菌緩衝液 pH5 : 標識) (資料 代-13)

[GLP]

報告書作成年 : 2012 年

供試化合物 : [  $^{14}\text{C}$  ] 標識 トリアファモン

構造式 :



\* :  $^{14}\text{C}$  標識位置

化学名 : 2'-[(4,6-ジメトキシ-1,3,5-トリアジソン-2-イル)カルボニル]  
-1,1,6'-トリフルオロ-N-メチルメタンсульホンアミド

放射化学的純度 :

化学的純度 :

比放射能量 :

供試緩衝液 : 用いた緩衝液の pH 及び調製方法を以下に記載した。

| pH | 濃度及び種類      | 調製方法  |
|----|-------------|---|
| 5  | 0.01M 酢酸緩衝液 | $\text{NaC}_2\text{H}_3\text{O}_2 \times 3\text{H}_2\text{O}$ 1.36g を水 250mL に溶解し、氷酢酸を用いて pH5.0 に調整し、希釈して 0.01 モル濃度とした。オートクレーブを用いて滅菌した。 |

光源 : 290nm 以下の波長を遮蔽するフィルターを装着したキセノンランプを用いた。  
光強度 :  $782\text{W}/\text{m}^2$  (波長範囲 300~800 nm)

【試験方法】 :

[  $^{14}\text{C}$  ] トリアファモン 8.79 mg をアセトニトリル 8.78mL に溶解し、名目 1 mg/mL の溶液を調製し、この 1mL を滅菌緩衝液 9mL を用いて希釈し、0.11mg/mL (実測濃度) の処理溶液を調製した。この処理溶液 3mL を滅菌緩衝液 297mL を用いて希釈し、1.1 mg/L 濃度の試験溶液を調製した。アセトニトリル含量は 0.1% となる。

この試験溶液 10mL を石英ガラス容器に分注し (2 反復)、全ての試料にソーダライム及び PU 栓からなる揮発性物質捕集管を装着し、25°C に設定したサンテスト装置を用いて試験した。暗対照試料は 25°C の気象チャンバー内で暗黒下に試験した。

各試験溶液を 0、1、2、4、7、9、10 日後に採取した。各採取時点に、pH の確認及び滅菌性の確認を行った。

|      |           |                         |
|------|-----------|-------------------------|
| 試験濃度 | 名目：       | 1.0 mg/L                |
|      | 実測：       | 1.1 mg/L                |
| 試験温度 | 照射試料 実測：  | 平均 24.7°C (23.8~25.6°C) |
|      | 暗対照試料 実測： | 平均 25.2°C (25.1~25.5°C) |
| 補助溶媒 | アセトニトリル   | 0.1%                    |

採取した試料は 100  $\mu$ L を 3 反復で LSC 測定し放射エネルギーを求めた。被験物質及び分解物の定量分析は逆相 HPLC における放射能検出で行い、加えて代表試料は順相 TLC を用いて分析し確認した。被験物質及び分解物の同定には HPLC-MS、HPLC-MS/MS 及び標準品とのクロマトグラフィーを用いた。

【結果】：

1) 回収・分布 (表 1、表 2)

照射試料における放射能回収率は 98.7~101.5% (平均 99.7%) であった。暗対照試料では 98.7~100.2% (平均 100.0%) であった。

照射試料において CO<sub>2</sub> が試験終了時に最大 3.0%認められ、揮発性有機物は 0.1%以下であった。暗対照試料では最終散布時点のみで揮発性物質を分析したが、CO<sub>2</sub> 及び有機揮発性物質共に 0.1%以下であった。



表 1 照射試料における物質収支 (処理放射能に対する%)

|           |                 | 採取時期 [日] |      |      |      |       |      |       |
|-----------|-----------------|----------|------|------|------|-------|------|-------|
|           |                 | 0        | 1    | 2    | 4    | 7     | 9    | 10    |
| 揮発性<br>物質 | CO <sub>2</sub> | n. a.    | 0.0  | 0.1  | 0.5  | 1.5   | 2.7  | 3.0   |
|           | 揮発性有機物          | n. a.    | 0.0  | 0.0  | 0.0  | 0.1   | 0.1  | 0.0   |
|           | 計               | n. a.    | 0.0  | 0.1  | 0.6  | 1.6   | 2.9  | 3.0   |
| 溶液中の放射能   |                 | 100.0    | 99.2 | 98.8 | 98.2 | 98.4  | 96.6 | 98.5  |
| 合計        |                 | 100.0    | 99.2 | 98.9 | 98.7 | 100.0 | 99.5 | 101.5 |
| 平均        |                 | 99.7     |      |      |      |       |      |       |

表 2 暗対照試料における物質収支 (処理放射能に対する%)

|           |                 | 採取時期 [日] |       |       |       |       |       |       |
|-----------|-----------------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|           |                 | 0        | 1     | 2     | 4     | 7     | 9     | 10    |
| 揮発性<br>物質 | CO <sub>2</sub> | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.0   |
|           | 揮発性有機物          | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.0   |
|           | 計               | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.1   |
| 溶液中の放射能   |                 | 100.0    | 98.7  | 98.9  | 99.6  | 100.4 | 100.5 | 102.0 |
| 合計        |                 | 100.0    | 98.7  | 98.9  | 99.6  | 100.4 | 100.5 | 102.0 |
| 平均        |                 | 100.0    |       |       |       |       |       |       |

n. a. : 分析せず。表記 0.0 は、処理放射能量が 40817 Bq であるので試料の放射能量が 20.4 Bq 未満の場合、処理放射能に対する%での表記 (小数点以下 1 桁) では 0.0 となる。LSC 測定における定量下限 (LOQ) は 1.5 Bq/測定試料。

## 2) 分解物

照射試料においてトリアファモンは 10 日後には 65.4%まで減少した。トリアファモン以外の沢山の分解物が認められ、合計は最大で 33.0%であったが、単一成分としては最大で 4.6%であり、各成分の同定は行わなかった。暗対照試料では、トリアファモンの分解は認められなかった

表 3 [ <sup>14</sup>C] トリアファモンの光分解物の分布 (処理放射能に対する%)

|                          | 照射時間 [日]           |      |      |      |       |      |       |      |
|--------------------------|--------------------|------|------|------|-------|------|-------|------|
|                          | 東京換算 <sup>1)</sup> | 0    | 7.4  | 14.9 | 29.7  | 52.0 | 66.9  | 74.3 |
|                          | 実験期間               | 0    | 1    | 2    | 4     | 7    | 9     | 10   |
| トリアファモン                  | 100.0              | 95.5 | 92.6 | 81.9 | 75.4  | 65.4 | 65.4  |      |
| RT 42.5 <sup>2)</sup>    | n. d.              | 1.1  | 2.0  | 3.4  | 4.0   | 4.6  | 4.2   |      |
| RT 48.5 <sup>2)</sup>    | n. d.              | 0.6  | 1.0  | 1.6  | 2.3   | 3.6  | 3.5   |      |
| RT 53.8 <sup>2)</sup>    | n. d.              | 0.3  | 0.3  | 0.6  | 0.8   | 1.2  | 1.0   |      |
| その他の少量分解物計 <sup>2)</sup> | n. d.              | 1.7  | 3.0  | 10.6 | 15.8  | 21.9 | 24.3  |      |
| 計                        | 100.0              | 99.2 | 98.8 | 98.2 | 98.4  | 96.6 | 98.5  |      |
| CO <sub>2</sub>          | n. a.              | 0.0  | 0.1  | 0.5  | 1.5   | 2.7  | 3.0   |      |
| 揮発性有機物                   | n. a.              | 0.0  | 0.0  | 0.0  | 0.1   | 0.1  | 0.0   |      |
| 合計                       | 100.0              | 99.2 | 98.9 | 98.7 | 100.0 | 99.5 | 101.5 |      |

1) 東京 (4-6 月) 換算、2) 最大 23 種のピーク。単一ピークの最大値は RT 42.5 の 4.6%  
 n. a. : 分析せず、n. d. : 検出せず。表記 0.0 は、処理放射エネルギーが 40817 Bq であるので試料の放射エネルギーが 20.4 Bq 未満の場合、処理放射能に対する%での表記 (小数点以下 1 桁) では 0.0 となる。LSC 測定における定量下限 (LOQ) は 1.5 Bq/測定試料。

表 4 暗対照試料における放射能の分布 (処理放射能に対する%)

|                 | 採取時期 [日] |       |       |       |       |       |       |
|-----------------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                 | 0        | 1     | 2     | 4     | 7     | 9     | 10    |
| トリアファモン         | 100.0    | 98.7  | 98.9  | 99.6  | 100.4 | 100.5 | 102.0 |
| CO <sub>2</sub> | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.0   |
| 揮発性有機物          | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.0   |
| 合計              | 100.0    | 98.7  | 98.9  | 99.6  | 100.4 | 100.5 | 102.0 |

n. a. : 分析せず、n. d. : 検出せず

3) 推定半減期

トリアファモンの DT<sub>50</sub> を 1 次速度式にしたがって求めた。実験条件下における推定半減期は 15.8 日 (782W/m<sup>2</sup> (波長範囲 300~800 nm)) であり、東京 (4-6 月) に換算すると 117.4 日と計算された。

表 5 [ <sup>14</sup>C] トリアファモンの水中光分解における DT<sub>50</sub>

| 実験条件下  | 東京 (4-6 月) |
|--------|------------|
| 15.8 日 | 117.4 日    |

[ <sup>14</sup>C] トリアファモンは水中で光により、沢山の少量分解物及び CO<sub>2</sub> へ分解した。

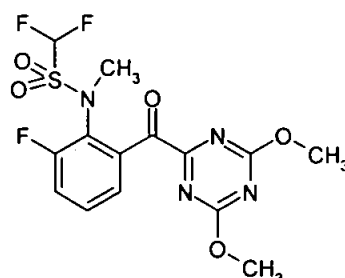
図1 [ <sup>14</sup>C] トリアファモンの推定水中光解経路

(4) 水中光分解動態試験 (滅菌緩衝液 pH5、 標識) (資料 代-14)

[GLP]

報告書作成年: 2012年

供試化合物: [ <sup>14</sup>C ] トリアファモン  
構造式



\*: <sup>14</sup>C 標識位置

化学名: 2'-[(4,6-ジ'メトキシ-1,3,5-トリアジソン-2-イル)カルボ'ニル]  
-1,1,6'-トリフルオロ-N-メチルメタンсульホニアリド'

放射化学的純度:  
化学的純度:  
比放射能量:

供試緩衝液: 用いた緩衝液の pH 及び調製方法を以下に記載した。

| pH | 濃度及び種類      | 調製方法   |
|----|-------------|--|
| 5  | 0.01M 酢酸緩衝液 | NaC <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> × 3H <sub>2</sub> O 1.36g を水 250mL に溶解し、氷酢酸を用いて pH5.0 に調整し、希釈して 0.01 モル濃度とした。オートクレーブを用いて滅菌した。 |

光源: 290nm以下の波長を遮蔽するフィルターを装着したキセノンランプを用いた。  
光強度: 765W/m<sup>2</sup> (波長範囲 300~800nm)

【試験方法】:

[ <sup>14</sup>C ] トリアファモン 12mg をアセトニトリル 12mL に溶解し、名目濃度 1 mg/mL の溶液を調製し、この 1mL を滅菌緩衝液を用いて 10mL に定容し、0.098mg/mL (実測濃度) の処理溶液を調製した。この処理溶液 3mL を滅菌緩衝液を用いて 300mL に定容し、0.99 mg/L 濃度の試験溶液を調製した。アセトニトリル含量は 0.1% となる。

この試験溶液 10mL を石英ガラス容器に分注し (2 反復)、全ての試料にソーダライム及びポリウレタン栓からなる揮発性物質捕集管を装着し、25°C に設定したサンテスト装置を用いて試験した。暗対照試料は 25°C の気象チャンバー内で暗黒下に試験した。

各試験溶液を 0、1、2、4、7、9、10 日後に採取した。各採取時点ごとに、pH の確認及び滅菌性の確認を行った。

|      |           |                         |
|------|-----------|-------------------------|
| 試験濃度 | 名目：       | 1.0 mg/L                |
|      | 実測：       | 0.99 mg/L               |
| 試験温度 | 照射試料 実測：  | 平均 24.3°C (23.4~26.7°C) |
|      | 暗対照試料 実測： | 平均 25.4°C (24.8~25.6°C) |
| 補助溶媒 | アセトニトリル   | 0.1%                    |

採取した試料は 100 µL を 3 反復で LSC 測定し放射エネルギーを求めた。被験物質及び分解物の定量分析は逆相 HPLC における放射能検出で行い、加えて代表試料は順相 TLC を用いて分析し確認した。被験物質及び分解物の同定には HPLC-MS、HPLC-MS/MS 及び標準品とのコクロマトグラフィーを用いた。

【結果】：

1) 分布

照射試料における放射能回収率は 99.2~102.0% (平均 100.4%)、暗対照試料では 96.0~102.4% (平均 100.2%) であった。

照射試料において CO<sub>2</sub> が試験終了時に最大 3.3% 認められ、顕著な量の揮発性有機物は認められなかった (最大 0.8%)。暗対照試料では最終散布時点のみ揮発性物質を分析したが、CO<sub>2</sub> 及び有機揮発性物質共に 0.1% 以下であった。

表 1 照射試料における物質収支 (処理放射能に対する%)

|           |                 | 採取時期 [日] |      |      |       |       |                   |                   |
|-----------|-----------------|----------|------|------|-------|-------|-------------------|-------------------|
|           |                 | 0        | 1    | 2    | 4     | 7     | 9                 | 10                |
| 揮発性<br>物質 | CO <sub>2</sub> | n. a.    | 0.1  | 0.4  | 1.0   | 2.3   | 3.0               | 3.3               |
|           | 揮発性有機物          | n. a.    | 0.0  | 0.0  | 0.1   | 0.1   | 0.7 <sup>1)</sup> | 0.8 <sup>1)</sup> |
|           | 計               | n. a.    | 0.1  | 0.4  | 1.1   | 2.4   | 3.7               | 4.1               |
| 溶液中の放射能   |                 | 100.0    | 99.1 | 99.2 | 98.9  | 97.9  | 98.0              | 97.9              |
| 合計        |                 | 100.0    | 99.2 | 99.6 | 100.0 | 100.2 | 101.7             | 102.0             |
| 平均        |                 | 100.4    |      |      |       |       |                   |                   |

1) 揮発性有機物の上昇が認められているが、PU 栓の汚染の可能性が考えられる。

表2 暗対照試料における物質収支 (処理放射能に対する%)

|           |                 | 採取時期 [日] |       |       |       |       |       |       |
|-----------|-----------------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|           |                 | 0        | 1     | 2     | 4     | 7     | 9     | 10    |
| 揮発性<br>物質 | CO <sub>2</sub> | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.1   |
|           | 揮発性有機物          | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.1   |
|           | 計               | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.1   |
| 溶液中の放射能   |                 | 100.0    | 99.7  | 100.6 | 96.0  | 101.3 | 101.4 | 102.2 |
| 合計        |                 | 100.0    | 99.7  | 100.6 | 96.0  | 101.3 | 101.4 | 102.4 |
| 平均        |                 | 100.2    |       |       |       |       |       |       |

n. a. : 分析せず

2) 分解物

照射試料においてトリアファモンは10日後には64.5%まで減少した。沢山の分解物が認められたが、単一成分としては最大で4.5%であったため、同定は行わなかった。溶液中のトリアファモン以外の分解物の合計は最大で33.4%であった。暗対照試料では、トリアファモンの分解は認められなかった

表3 [ <sup>14</sup>C ] トリアファモンの光分解物の分布 (処理放射能に対する%)

|                          |                     | 採取時期 [日]           |       |      |       |       |                   |                   |      |
|--------------------------|---------------------|--------------------|-------|------|-------|-------|-------------------|-------------------|------|
|                          |                     | 東京換算 <sup>1)</sup> | 0     | 7.3  | 14.5  | 29.1  | 50.9              | 65.5              | 72.7 |
|                          |                     | 実験期間               | 0     | 1    | 2     | 4     | 7                 | 9                 | 10   |
| トリアファモン                  |                     | 100.0              | 97.0  | 90.3 | 82.9  | 68.6  | 66.5              | 64.5              |      |
|                          | RT 37 <sup>3)</sup> | n. d.              | n. d. | 1.3  | 1.6   | 3.0   | 3.2               | 3.0               |      |
|                          | RT 42 <sup>3)</sup> | n. d.              | 1.4   | 2.3  | 2.8   | 4.3   | 4.3               | 4.5               |      |
|                          | RT 48 <sup>3)</sup> | n. d.              | 0.4   | 1.1  | 2.0   | 2.1   | 3.2               | 3.5               |      |
| その他の少量分解物計 <sup>3)</sup> |                     | n. d.              | 0.5   | 4.1  | 9.7   | 20.0  | 20.8              | 22.4              |      |
| 計                        |                     | 100.0              | 99.1  | 99.2 | 98.9  | 97.9  | 98.0              | 97.9              |      |
| CO <sub>2</sub>          |                     | n. a.              | 0.1   | 0.4  | 1.0   | 2.3   | 3.0               | 3.3               |      |
| 揮発性有機物                   |                     | n. a.              | 0.0   | 0.0  | 0.1   | 0.1   | 0.7 <sup>2)</sup> | 0.8 <sup>2)</sup> |      |
| 合計                       |                     | 100.0              | 99.2  | 99.6 | 100.0 | 100.2 | 101.7             | 102.0             |      |

n. a. : 分析せず、n. d. : 検出せず。

表記0.0は、処理放射能量が44009 Bqであるので22.0 Bq未満の場合、処理放射能に対する% (小数点以下1桁) では0.0となる。LSC測定における定量下限 (LOQ) は1.5 Bq/測定試料。

- 1) 東京 (4-6月) 換算。
- 2) 揮発性有機物の上昇が認められているが、PU栓の汚染の可能性が考えられる。
- 3) 最大17種のピーク。単一ピークの最大値はRT 42の4.5%であった。

表 4 暗対照試料における放射能の分布 (処理放射能に対する%)

| 化合物             | 採取時期 [日] |       |       |       |       |       |       |
|-----------------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                 | 0        | 1     | 2     | 4     | 7     | 9     | 10    |
| トリアファモン         | 100.0    | 99.7  | 100.6 | 96.0  | 101.3 | 101.4 | 102.2 |
| その他の分解物         | n. d.    | n. d. | n. d. | n. d. | n. d. | n. d. | n. d. |
| CO <sub>2</sub> | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.1   |
| 揮発性有機物          | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.1   |
| 合計              | 100.0    | 99.7  | 100.6 | 96.0  | 101.3 | 101.4 | 102.4 |

n. a. : 分析せず、n. d. : 検出せず

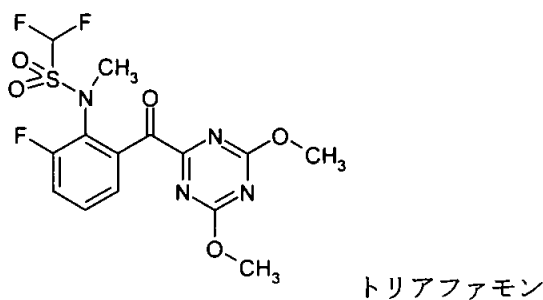
### 3) 推定半減期

トリアファモンの DT<sub>50</sub> を 1 次速度式にしたがって求めた。実験条件下における推定半減期は 14.8 日 (765W/m<sup>2</sup> (波長範囲 300~800nm)) であり、東京 (4-6 月) に換算すると 107.6 日と計算された。

表 5 [ <sup>14</sup>C ] トリアファモンの水中光分解における DT<sub>50</sub>

| 実験条件下  | 東京 (4-6 月) |
|--------|------------|
| 14.8 日 | 107.6 日    |

[ <sup>14</sup>C ] トリアファモンは水中で光により、沢山の少量分解物及び CO<sub>2</sub> へ分解した。



複数の少量分解物 (<5%AR) + CO<sub>2</sub>

図 1 [ <sup>14</sup>C ] トリアファモンの推定水中光解経路

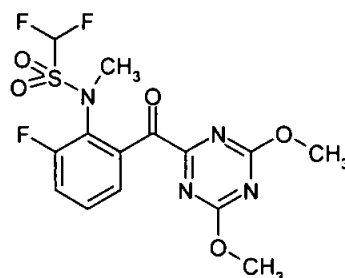
(5) 水中光分解動態試験 - 自然水 ( 標識 ) (資料 代-15)

[GLP]

報告書作成年： 2013年

供試化合物：[ <sup>14</sup>C ] トリアファモン

構造式



\* : <sup>14</sup>C 標識位置

化学名： 2'-[(4,6-ジメトキシ-1,3,5-トリアジノン-2-イル)カルボニル]-1,1,6'-トリフルオロ-N-メチルメタンсульホニアリド

放射化学的純度：

化学的純度：

比放射能量：

供試自然水：ライン川の深さ約 50 cm から採取した水をオートクレーブを用いて滅菌し試験に供した。採取時の pH は 7.9 であったが、オートクレーブ後は 8.5 であった。特性を以下に示した

|          |            |               |            |
|----------|------------|---------------|------------|
| pH：      | 7.9/8.5    | DOC (溶存有機炭素)： | 3 mg/L     |
| 懸濁物質：    | 9 mg/L     | TOC (総有機炭素)：  | 3 mg/L     |
| 総揮発性残留物： | 500 mg/L   | 硬度：           | 10.0° dH   |
| 酸素飽和度：   | 97% 20°C   | 総りん：          | 0.063 mg/L |
| 電導度：     | 430 μ S/cm | 総窒素：          | 2.3 mg/L   |

光源： 290nm以下の波長を遮蔽するフィルターを装着したキセノンランプを用いた。  
光強度： 782 W/m<sup>2</sup> (波長範囲 300~800 nm)



【試験方法】:

[  $^{14}\text{C}$ ] トリアファモン 8.79 mg をアセトニトリル 8.78 mL に溶解し、名目濃度 1 mg/mL の溶液を調製し、この溶液の 1 mL と滅菌河川水 9 mL を混合し、処理溶液を調製した。この処理溶液 3 mL を滅菌河川水を用いて 300 mL に定容し、1.1 mg/L 濃度 (実測値) の試験溶液を調製した。アセトニトリル含量は 0.1% となる。

この試験溶液 10 mL を石英ガラス容器に分注し (2 反復)、全ての試料にソーダライム及びポリウレタン栓からなる揮発性物質捕集管を装着し、25°C に設定したサンテスト装置を用いて試験した。暗対照試料は 25°C の気象チャンバー内で暗黒下に試験した。

各試験溶液を 0、0.25、1、1.25、2.25、3.25、4.25 日後に採取した。各採取時点に、pH の確認及び滅菌性の確認を行った。

|      |           |                         |
|------|-----------|-------------------------|
| 試験濃度 | 名目:       | 1.0 mg/L                |
|      | 実測:       | 1.1 mg/L                |
| 試験温度 | 照射試料 実測:  | 平均 25.1°C (24.0~26.3°C) |
|      | 暗対照試料 実測: | 平均 25.0°C (24.9~25.1°C) |
| 補助溶媒 | アセトニトリル   | 0.1%                    |

採取した試料は 100  $\mu\text{L}$  を 3 反復で LSC 測定し放射エネルギーを求めた。被験物質及び分解物の定量分析は逆相 HPLC における放射能検出で行い、更に TLC で確認した。加えて一部の極性画分は順相 TLC を用いて分画し、定量した。被験物質及び分解物の同定には HPLC-MS (/MS)、HPLC-NMR-MS 及び標準品とのコクロマトグラフィーを用いた。

【結果】:

1) 分布

照射試料における放射能回収率は 96.7~100.2% (平均 99.2%) であった。暗対照試料では 100.0~101.6% (平均 100.7%) であった。

照射試料において  $\text{CO}_2$  が試験終了時に最大 0.7% 認められ、揮発性有機物は 0.1% 検出された。暗対照試料では有機揮発性物質が 0.1% 検出された。

表 1 照射試料における物質収支 (処理放射能に対する%)

|           |                 | 採取時期 [日]          |       |      |       |      |      |      |      |
|-----------|-----------------|-------------------|-------|------|-------|------|------|------|------|
|           |                 | 東京換算 <sup>1</sup> | 0     | 2    | 7     | 9    | 17   | 24   | 32   |
|           |                 | 実験期間              | 0     | 0.25 | 1.0   | 1.25 | 2.25 | 3.25 | 4.25 |
| 揮発性<br>物質 | CO <sub>2</sub> | n. a.             | 0.0   | 0.0  | 0.0   | 0.2  | 0.4  | 0.7  |      |
|           | 揮発性有機物          | n. a.             | 0.0   | 0.0  | 0.0   | 0.0  | 0.1  | 0.0  |      |
|           | 小計              | n. a.             | 0.0   | 0.0  | 0.0   | 0.2  | 0.5  | 0.8  |      |
| 溶液中の放射能   |                 | 100.0             | 100.2 | 99.8 | 100.0 | 99.0 | 98.0 | 95.9 |      |
| 合計        |                 | 100.0             | 100.2 | 99.8 | 100.0 | 99.2 | 98.5 | 96.7 |      |

平均:99.2、最小:96.7、最大:100.2、RSD:1.28%

1: 東京(4-6月)換算の照射日数

表 2 暗対照試料における物質収支 (処理放射能に対する%)

|           |                 | 採取時期 [日] |       |       |       |       |       |       |
|-----------|-----------------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|           |                 | 0        | 0.25  | 1     | 1.25  | 2.25  | 3.25  | 4.25  |
| 揮発性<br>物質 | CO <sub>2</sub> | n. a.    | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   |
|           | 揮発性有機物          | n. a.    | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   |
|           | 小計              | n. a.    | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.1   | 0.0   | 0.0   |
| 溶液中の放射能   |                 | 100.0    | 100.1 | 100.4 | 100.9 | 100.6 | 101.4 | 101.6 |
| 合計        |                 | 100.0    | 100.1 | 100.4 | 100.9 | 100.6 | 101.5 | 101.6 |

平均:100.7、最小:100.0、最大:100.7、RSD:0.64%

n. a.: 分析せず

表記0.0は、処理放射能量が44087 Bqであるので22.0 Bq以下の場合、処理放射能に対する% (小数点以下1桁)では0.0となる。LSC測定における定量下限(LOQ)は1.5 Bq/測定試料。

## 2) 分解物

照射試料において、処理放射能の10%以上生成した分解物は1種のみであった。

が3.25日後に21.3%の最大濃度で生成した。さらに、2種の10%未満の光分解物が4.25日後に5.8%及び8.0%の最大量で生成し、それぞれ、

と同定された(表3)。

分析に用いた逆相HPLC法では完全に分離できない極性画分(u1)が存在し、4.25日後に25.5%であった。この画分を採取し、順相TLCで分析した。主要な成分3種が認められ、最大の成分でも3.9%であった(表4)。各成分は少量であったため、同定は実施しなかった。

暗対照試料において、トリアファモンは 4.25 日後に 8.3%まで減少した。これは、河川水のアルカリ性 pH における速やかな加水分解が原因であると考えられた。

が 92.1%の最大量で生成した。

表 3 [ <sup>14</sup>C]トリアファモンの自然水光分解物の分布(処理放射能に対する%)

|                    | 採取時期 [日]          |       |       |      |       |      |      |      |
|--------------------|-------------------|-------|-------|------|-------|------|------|------|
|                    | 東京換算 <sup>1</sup> | 0     | 2     | 7    | 9     | 17   | 24   | 32   |
|                    | 実験期間              | 0     | 0.25  | 1    | 1.25  | 2.25 | 3.25 | 4.25 |
| トリアファモン [I]        |                   | 98.9  | 96.3  | 68.4 | 68.6  | 40.1 | 25.8 | 14.5 |
| 未同定合計 <sup>2</sup> |                   | 0.0   | 2.6   | 21.2 | 19.6  | 34.0 | 40.1 | 47.6 |
| 小計                 |                   | 100.0 | 100.2 | 99.8 | 100.0 | 99.0 | 98.0 | 95.9 |
| CO <sub>2</sub>    |                   | n. a. | 0.0   | 0.0  | 0.0   | 0.2  | 0.4  | 0.7  |
| 揮発性有機物             |                   | n. a. | 0.0   | 0.0  | 0.0   | 0.0  | 0.1  | 0.0  |
| 合計                 |                   | 100.0 | 100.2 | 99.8 | 100.0 | 99.2 | 98.5 | 96.7 |

n. d. : 検出せず、n. a. : 分析せず

1 : 東京 (4-6 月) 換算の照射日数

2 : 未同定少量代謝物の含量。単一ピークの最大値は 3.9%AR であった。

表記 0.0 は、処理放射能量が 44087 Bq であるので 22.0 Bq 以下の場合、処理放射能に対する% (小数点以下 1 桁) では 0.0 となる。LSC 測定における定量下限 (LOQ) は 1.5 Bq/測定試料。

表 4 HPLC 画分 "u1" の TLC による分離・定量

| 試料 ID  | RA   |  |  |  |  |
|--------|------|--|--|--|--|
|        | %TAR |  |  |  |  |
| 2.25-I | 99.1 |  |  |  |  |
|        | 98.9 |  |  |  |  |
| 3.25-I | 98.5 |  |  |  |  |
|        | 97.5 |  |  |  |  |
| 4.25-I | 96.1 |  |  |  |  |
|        | 95.7 |  |  |  |  |

1 u1 : HPLC 画分を採取し、TLC で分離・定量した。

2 u1 の面積%は HPLC 測定値のもの。

3 P4, P7 及び P11 は TLC における主なピーク

表5 暗対照試料における放射能の分布 (処理放射能に対する%)

| 化合物             | 採取時期 [日] |       |       |       |       |       |       |
|-----------------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                 | 0        | 0.25  | 1     | 1.25  | 2.25  | 3.25  | 4.25  |
| トリアファモン [I]     | 98.9     | 94.1  | 68.4  | 59.5  | 26.6  | 14.3  | 8.3   |
| 小計              | 100.0    | 100.1 | 100.4 | 100.9 | 100.6 | 101.4 | 101.6 |
| CO <sub>2</sub> | n. a.    | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   |
| 揮発性有機物          | n. a.    | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   | 0.0   |
| 合計              | 100.0    | 100.1 | 100.4 | 100.9 | 100.6 | 101.5 | 101.6 |

n. a. : 分析せず、n. d. : 検出せず

表記0.0は、処理放射能量が44087 Bqであるので22.0 Bq以下の場合、処理放射能に対する% (小数点以下1桁) では0.0となる。LSC測定における定量下限 (LOQ) は1.5 Bq/測定試料。

### 3) 推定半減期

トリアファモンのDT<sub>50</sub>を1次速度式にしたがって求めた。実験条件下における推定半減期は1.7日 (782 W/m<sup>2</sup> (波長範囲300~800nm)) であり、東京 (4-6月) に換算すると12.6日と計算された。

表6 [ <sup>14</sup>C ] トリアファモンの水中光分解 (自然水) におけるDT<sub>50</sub>

| 実験条件下 | 東京(4-6月) |
|-------|----------|
| 1.7日  | 12.6日    |

|       |
|-------|
| 暗対照試料 |
| 1.3日  |

トリアファモンは照射中においても  $\rightarrow$ 加水分解されることが推定されるが、照射試料において検出されておらず、速やかに  $\rightarrow$ 分解すると考えられる。その後、 $\rightarrow$ 酸化され、 $\rightarrow$ される。

[ <sup>14</sup>C ] トリアファモンの自然水中における光分解経路を以下に示した。

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

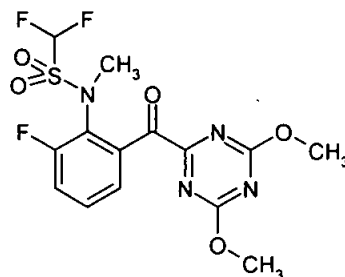
図1 [ <sup>14</sup>C] トリアファモンの自然水中における推定光分解経路

(6) 水中光分解動態試験 - 自然水 ( 標識 ) (資料 代-16)

[GLP]

報告書作成年 : 2013 年

供試化合物 : [ <sup>14</sup>C ] トリアファモン  
構造式



\* : <sup>14</sup>C 標識位置

化学名 : 2'-[(4,6-ジメチル-1,3,5-トリアジソン-2-イル)カルボニル]-1,1,6'-トリフルオロ-N-メチルメタンсульホニアリド

放射化学的純度 :

化学的純度 :

比放射能量 :

供試自然水 : ライン川の深さ約 50 cm から採取した水をオートクレーブを用いて滅菌し試験に供した。採取時の pH は 7.9 であったが、オートクレーブ後には 8.2 まで増加した。特性を以下に示した

|           |            |                |           |
|-----------|------------|----------------|-----------|
| pH :      | 7.9/8.2    | DOC (溶存有機炭素) : | 3 mg/L    |
| 懸濁物質 :    | 212 mg/L   | TOC (総有機炭素) :  | 3 mg/L    |
| 総揮発性残留物 : | 340 mg/L   | 硬度 :           | 11.8° dH  |
| 酸素飽和度 :   | 93% 7°C    | 総りん :          | 0.07 mg/L |
| 電導度 :     | 546 μ S/cm | 総窒素 :          | 3.3 mg/L  |

光源 : 290nm 以下の波長を遮蔽するフィルターを装着したキセノンランプを用いた。  
光強度 : 766 W/m<sup>2</sup> (波長範囲 300~800 nm)

【試験方法】:

[  $^{14}\text{C}$ ] トリアファモン 12 mg をアセトニトリル 12 mL に溶解し、名目濃度 1 mg/mL の溶液を調製し、この溶液の 1 mL を滅菌河川水を用いて 10 mL に定容し、処理溶液を調製した。この処理溶液 3 mL を滅菌河川水を用いて 300 mL に定容し、1.1 mg/L 濃度 (実測値) の試験溶液を調製した。アセトニトリル含量は 0.1% となる。

この試験溶液 10 mL を石英ガラス容器に分注し (2 反復)、全ての試料にソーダライム及びポリウレタン栓からなる揮発性物質捕集管を装着し、25°C に設定したサンテスト装置を用いて試験した。暗対照試料は 25°C の気象チャンバー内で暗黒下に試験した。

各試験溶液を 0、0.25、1、1.25、2.25、3.25、4.25 日後に採取した。各採取時点に、pH の確認及び滅菌性の確認を行った。

|      |           |                         |
|------|-----------|-------------------------|
| 試験濃度 | 名目:       | 1.0 mg/L                |
|      | 実測:       | 1.1 mg/L                |
| 試験温度 | 照射試料 実測:  | 平均 25.3°C (23.0~26.9°C) |
|      | 暗対照試料 実測: | 平均 24.9°C (24.8~25.0°C) |
| 補助溶媒 | アセトニトリル   | 0.1%                    |

採取した試料は 100  $\mu\text{L}$  を 3 反復で LSC 測定を行い放射エネルギーを求めた。被験物質及び分解物の定量分析は逆相 HPLC における放射能検出で行い、更に TLC で確認した。加えて一部の極性画分は順相 TLC を用いて分画し、定量した。被験物質及び分解物の同定には HPLC-MS (/MS)、HPLC-NMR-MS 及び標準品とのクロマトグラフィーを用いた。

【結果】:

1) 分布

照射試料における放射能回収率は 92.6~100.0% (平均 96.9%) であった。暗対照試料では 99.3~100.4% (平均 99.8%) であった。

照射試料において  $\text{CO}_2$  が試験終了時に最大 3.3% 認められ、顕著な量の揮発性有機物は認められなかった ( $\leq 0.1\%$ )。暗対照試料では最終採取時点のみで揮発性物質を分析したが、 $\text{CO}_2$  及び有機揮発性物質共に検出されなかった。

表 1 照射試料における物質収支 (処理放射能に対する%)

|           |                 | 採取時期 [日]          |      |      |      |      |      |      |      |
|-----------|-----------------|-------------------|------|------|------|------|------|------|------|
|           |                 | 東京換算 <sup>1</sup> | 0    | 1.8  | 7.3  | 9.1  | 16.4 | 23.7 | 30.9 |
|           |                 | 実験期間              | 0    | 0.25 | 1.0  | 1.25 | 2.25 | 3.25 | 4.25 |
| 揮発性<br>物質 | CO <sub>2</sub> | n. a.             | 0.0  | 0.1  | 0.4  | 1.1  | 2.3  | 3.3  |      |
|           | 揮発性有機物          | n. a.             | 0.0  | 0.0  | 0.0  | 0.0  | 0.1  | 0.0  |      |
|           | 小計              | n. a.             | 0.0  | 0.2  | 0.4  | 1.1  | 2.3  | 3.3  |      |
| 溶液中の放射能   |                 | 100.0             | 99.2 | 98.0 | 97.2 | 95.1 | 92.2 | 89.3 |      |
| 合計        |                 | 100.0             | 99.2 | 98.2 | 97.6 | 96.2 | 94.5 | 92.6 |      |
| 平均        |                 | 96.9              |      |      |      |      |      |      |      |

1: 東京 (4-6 月) における太陽光換算

表 2 暗対照試料における物質収支 (処理放射能に対する%)

|           |                 | 採取時期 [日] |       |       |       |       |       |       |
|-----------|-----------------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|           |                 | 0        | 0.25  | 1     | 1.25  | 2.25  | 3.25  | 4.25  |
| 揮発性<br>物質 | CO <sub>2</sub> | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.0   |
|           | 揮発性有機物          | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.0   |
|           | 小計              | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.0   |
| 溶液中の放射能   |                 | 100.0    | 99.5  | 99.3  | 99.7  | 99.8  | 100.2 | 100.4 |
| 合計        |                 | 100.0    | 99.5  | 99.3  | 99.7  | 99.8  | 100.2 | 100.4 |
| 平均        |                 | 99.8     |       |       |       |       |       |       |

表記 0.0 は、処理放射能量が 53772 Bq であるので 26.8 Bq 以下の場合、処理放射能に対する% (小数点以下 1 桁) では 0.0 となる。LSC 測定における定量下限 (LOQ) は 1.5 Bq/測定試料。

## 2) 分解物

照射試料において、処理放射能の 10%以上生成した分解物は 1 種のみであった。

が 4.25 日後に 16.5%の最大濃度で生成した。さらに、2 種の 10%未満の光分解物が 4.25 日後に 5.8%及び 5.3%の最大量で生成し、それぞれ、

と同定された。

暗対照試料において、トリアファモンは 4.25 日後に 18.0%まで減少した。これは、河川水のアルカリ性 pH における速やかな加水分解が原因であると考えられた。

が 82.4%の最大量で生成した。



表 3 [ <sup>14</sup>C]トリアファモンの自然水光分解物の分布 (処理放射能に対する%)

|                    | 採取時期 [日]          |      |      |      |      |      |      |      |
|--------------------|-------------------|------|------|------|------|------|------|------|
|                    | 東京換算 <sup>1</sup> | 0    | 2    | 7    | 9    | 16   | 24   | 31   |
|                    | 実験期間              | 0    | 0.25 | 1    | 1.25 | 2.25 | 3.25 | 4.25 |
| トリアファモン [I]        | 100.0             | 95.9 | 76.4 | 61.9 | 45.1 | 31.5 | 23.3 |      |
| 未同定合計 <sup>2</sup> | 0.0               | 2.2  | 14.0 | 22.5 | 30.7 | 36.2 | 38.5 |      |
| 小計                 | 100.0             | 99.2 | 98.0 | 97.2 | 95.1 | 92.2 | 89.3 |      |
| CO <sub>2</sub>    | n. a.             | 0.0  | 0.1  | 0.4  | 1.1  | 2.3  | 3.3  |      |
| 揮発性有機物             | n. a.             | 0.0  | 0.0  | 0.0  | 0.0  | 0.0  | 0.0  |      |
| 合計                 | 100.0             | 99.2 | 98.2 | 97.6 | 96.2 | 94.5 | 92.6 |      |

n. d. : 検出せず、n. a. : 分析せず

1 : 東京 (4-6 月) における換算

2 : 未同定少量代謝物の含量。単一ピークの最大値は 5.1%AR であった。

表 4 暗対照試料における放射能の分布 (処理放射能に対する%)

|                 | 採取時期 [日] |       |       |       |       |       |       |  |
|-----------------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--|
|                 | 0        | 0.25  | 1     | 1.25  | 2.25  | 3.25  | 4.25  |  |
| トリアファモン [I]     | 100.0    | 95.6  | 74.5  | 65.7  | 42.2  | 27.6  | 18.0  |  |
| 小計              | 100.0    | 99.5  | 99.3  | 99.7  | 99.8  | 100.2 | 100.4 |  |
| CO <sub>2</sub> | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.0   |  |
| 揮発性有機物          | n. a.    | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | n. a. | 0.0   |  |
| 合計              | 100.0    | 99.5  | 99.3  | 99.7  | 99.8  | 100.2 | 100.4 |  |

n. a. : 分析せず、n. d. : 検出せず

表記 0.0 は、処理放射能量が 53772 Bq であるので 26.8 Bq 以下の場合、処理放射能に対する% (小数点以下 1 桁) では 0.0 となる。LSC 測定における定量下限 (LOQ) は 1.5 Bq/測定試料。

### 3) 推定半減期

トリアファモンの DT<sub>50</sub> を 1 次速度式にしたがって求めた。実験条件下における推定半減期は 1.9 日 (766 W/m<sup>2</sup> (波長範囲 300~800 nm)) であり、東京 (4-6 月) に換算すると 14.2 日と計算された。

表 5 [  $^{14}\text{C}$  ] トリアファモンの水中光分解 (自然水) における  $\text{DT}_{50}$

| 実験条件下 | 東京(4-6月) |
|-------|----------|
| 1.9日  | 14.2日    |

| 暗対照試料 |
|-------|
| 1.8日  |

トリアファモンは照射中においても  $\text{H}_2\text{O}$  へ加水分解されることが推定されるが、照射試料において検出されず、速やかに  $\text{H}_2\text{O}$  へ分解することが推定される。その後、 $\text{H}_2\text{O}$  へ酸化され、 $\text{H}_2\text{O}$  へ加水分解されることが推定された。[  $^{14}\text{C}$  ] トリアファモンの自然水中における光分解経路を以下に示した。

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

図1 [ <sup>14</sup>C] トリアファモンの自然水中における推定光分解経路

(7) の加水分解動態試験

(資料 代-17)

[GLP]

報告書作成年： 2012年

供試化合物：  
構造式

化学名：

化学的純度：

供試緩衝液： 用いた緩衝液の pH 及び調製方法を以下に記載した。

| pH | 濃度及び種類    | 調製方法   |
|----|-----------|--|
| 4  | 0.01M 酢酸  | CH <sub>3</sub> COONa 0.82g を水 250mL に溶解し、酢酸を用いて pH4 に調整し、0.04M 濃度を調製する。これを純水を用いて 4 倍希釈し、0.01M とする。  |
| 7  | 0.01M トリス | トリス(ヒドロキシメチル)-アミノメタン 0.60g を 0.1N 塩酸水溶液 23.3 mL に溶解した後、純水を用いて希釈する。この溶液を 0.1N 塩酸水溶液あるいは 0.1N 水酸化ナトリウム溶液を用いて pH 7 に調整する。   |
| 9  | 0.01M ホウ酸 | ホウ酸 0.62g 及び KCl 0.75g を水 250mL に溶解する。この溶液 125mL と 0.04N 水酸化ナトリウム水溶液 53mL を合わせ、水で希釈して 250mL とする。0.4N 水酸化ナトリウム水溶液あるいはホウ酸を用いて pH9 に調整し、0.02M 溶液を調製する。これを純水を用いて 2 倍希釈し、0.01M とする。 |

試験方法：

標準品をアセトニトリルに溶解し、1022 または 1000 mg/L の溶液を調製し、この 250  $\mu$ L を各 pH の緩衝液を用いて 250mL に定容し、1.0  $\mu$ g/mL の試験溶液を調製した。この試験溶液 5mL を 8mL 容のガラスバイアルに入れ（2 反復）、スクリーキャップをし、各実験温度に保たれたウォーターバスに入れ、暗黒下で試験した。

各試験溶液を以下の間隔で採取した。各採取時期に pH の確認を行い、滅菌性の確認は試験 2（25 $^{\circ}$ C）の最終採取時に行った。揮発性物質の捕集は行わなかった。

|      |                |                               |
|------|----------------|-------------------------------|
| 試験濃度 | 名目：            | 1.0 mg/L                      |
|      | 実測：            | 0.97~1.14 mg/L                |
| 試験温度 | 試験 1：          | 50 $^{\circ}$ C（予備試験）         |
|      | 試験 2：          | 25 $^{\circ}$ C（主試験）          |
|      | 試験 3：          | 20 $^{\circ}$ C（追加試験）         |
| 試験期間 | 試験 1：          | pH4 30 日間、pH7 30 日間、pH9 22 時間 |
|      | 試験 2：          | pH4, pH7, pH9 30 日間           |
|      | 試験 3：          | pH4, pH7, pH9 30 日間           |
| 補助溶媒 | アセトニトリル、約 0.1% |                               |

試料採取間隔

|                         | pH4                          | pH7                           | pH9                             |
|-------------------------|------------------------------|-------------------------------|---------------------------------|
| 試験 1 (50 $^{\circ}$ C)： | 0, 1, 3, 6, 10, 16, 24, 30 日 |                               | 0, 0.5, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 22 時間 |
| 試験 2 (25 $^{\circ}$ C)： |                              | 0, 3, 7, 10, 14, 17, 21, 30 日 |                                 |
| 試験 3 (20 $^{\circ}$ C)： |                              | 0, 1, 4, 8, 11, 18, 25, 30 日  |                                 |

採取した試料は 50  $\mu$ L をアセトニトリル/水<sub>pH</sub> (4/1、v/v) 950  $\mu$ L に添加して希釈し HPLC-MS/MS を用いて を定量した。pH9 及び pH7 の試料は採取時にギ酸 20  $\mu$ L を添加し、安定化させた。

結果：

の DT<sub>50</sub> 及び DT<sub>90</sub> を 1 次速度式にしたがって求めた。推定半減期は pH4 で 25.8 日 (50 $^{\circ}$ C)、295 日 (25 $^{\circ}$ C)、267 日 (20 $^{\circ}$ C)、pH7 で 36.3 日 (50 $^{\circ}$ C)、>1000 日 (25 $^{\circ}$ C)、210 日 (20 $^{\circ}$ C) であり、pH9 では 13 時間 (50 $^{\circ}$ C)、22.8 日 (25 $^{\circ}$ C)、66.6 日 (20 $^{\circ}$ C) であった。 の加水分解速度は温度及び pH に依存していることが確認された。

表1 の各 pH 及び温度における減衰

|      | 採取<br>時点<br>[日] | 50℃  |       | 採取<br>時点<br>[日] | 25℃  |       | 採取<br>時点<br>[日] | 20℃  |       |
|------|-----------------|------|-------|-----------------|------|-------|-----------------|------|-------|
|      |                 | mg/L | %TAR  |                 | mg/L | %TAR  |                 | mg/L | %TAR  |
| pH 4 | 0               | 1.14 | 100.0 | 0               | 1.08 | 100.0 | 0               | 1.06 | 100.0 |
|      | 1               | 1.12 | 98.5  | 3               | 0.98 | 91.1  | 1               | 1.05 | 99.3  |
|      | 3               | 1.08 | 94.7  | 7               | 0.98 | 91.4  | 4               | 1.10 | 104.3 |
|      | 6               | 1.01 | 88.9  | 10              | 0.98 | 90.9  | 8               | 1.13 | 106.7 |
|      | 10              | 0.83 | 73.1  | 14              | 1.06 | 98.1  | 11              | 1.08 | 102.3 |
|      | 16              | 0.76 | 66.5  | 17              | 0.94 | 87.7  | 18              | 1.02 | 96.6  |
|      | 24              | 0.63 | 55.4  | 21              | 0.98 | 91.2  | 25              | 1.06 | 100.4 |
|      | 30              | 0.50 | 43.7  | 30              | 0.96 | 89.5  | 30              | 0.97 | 91.2  |

|      | 採取<br>時点<br>[日] | 50℃  |       | 採取<br>時点<br>[日] | 25℃  |       | 採取<br>時点<br>[日] | 20℃  |       |
|------|-----------------|------|-------|-----------------|------|-------|-----------------|------|-------|
|      |                 | mg/L | %TAR  |                 | mg/L | %TAR  |                 | mg/L | %TAR  |
| pH 7 | 0               | 1.11 | 100.0 | 0               | 0.99 | 100.0 | 0               | 1.10 | 100.0 |
|      | 1               | 1.15 | 103.7 | 3               | 0.99 | 100.1 | 1               | 1.07 | 97.0  |
|      | 3               | 1.11 | 99.8  | 7               | 1.00 | 101.0 | 4               | 1.10 | 100.4 |
|      | 6               | 1.05 | 94.7  | 10              | 0.98 | 99.4  | 8               | 1.12 | 102.2 |
|      | 10              | 0.97 | 87.8  | 14              | 1.09 | 110.3 | 11              | 1.10 | 100.0 |
|      | 16              | 0.91 | 82.1  | 17              | 0.99 | 100.6 | 18              | 1.07 | 97.7  |
|      | 24              | 0.74 | 66.3  | 21              | 1.02 | 103.7 | 25              | 1.04 | 94.7  |
|      | 30              | 0.60 | 54.4  | 30              | 1.05 | 106.7 | 30              | 0.96 | 87.4  |

|      | 採取<br>時点<br>[時間] | 50℃  |       | 採取<br>時点<br>[日] | 25℃  |       | 採取<br>時点<br>[日] | 20℃  |       |
|------|------------------|------|-------|-----------------|------|-------|-----------------|------|-------|
|      |                  | mg/L | %TAR  |                 | mg/L | %TAR  |                 | mg/L | %TAR  |
| pH 9 | 0                | 1.07 | 100.0 | 0               | 0.97 | 100.0 | 0               | 1.05 | 100.0 |
|      | 0.5              | 1.06 | 98.8  | 3               | 0.98 | 100.8 | 1               | 1.03 | 97.8  |
|      | 1                | 1.03 | 96.1  | 7               | 0.80 | 81.8  | 4               | 1.01 | 96.4  |
|      | 2                | 1.03 | 96.1  | 10              | 0.70 | 72.0  | 8               | 0.98 | 93.0  |
|      | 3                | 0.90 | 84.1  | 14              | 0.70 | 71.4  | 11              | 0.95 | 90.2  |
|      | 4                | 0.82 | 76.6  | 17              | 0.58 | 59.1  | 18              | 0.86 | 81.6  |
|      | 5                | 0.77 | 71.5  | 21              | 0.53 | 54.8  | 25              | 0.83 | 78.4  |
|      | 6                | 0.76 | 71.1  | 30              | 0.41 | 41.9  | 30              | 0.76 | 72.3  |
|      | 22               | 0.38 | 35.3  |                 |      |       |                 |      |       |

%TAR 処理量に対する%

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

表 2                      の加水分解における DT<sub>50</sub> 及び DT<sub>90</sub>

| 温度    | pH | DT <sub>50</sub> | DT <sub>90</sub> |
|-------|----|------------------|------------------|
| 50° C | 4  | 25.8 日           | 85.8 日           |
|       | 7  | 36.3 日           | 121 日            |
|       | 9  | 13.0 時間          | 43.2 時間          |
| 25° C | 4  | 295 日            | 981 日            |
|       | 7  | >1000 日          | >1000 日          |
|       | 9  | 22.8 日           | 75.7 日           |
| 20° C | 4  | 267 日            | 887 日            |
|       | 7  | 210 日            | 698 日            |
|       | 9  | 66.6 日           | 221 日            |

(8) の水中光分解動態試験 (滅菌緩衝液 pH5) (資料 代-18)

[GLP]

報告書作成年： 2012年

供試化合物：

構造式：

化学名：

化学的純度：

供試緩衝液： 緩衝液の pH 及び調製方法を以下に記載した。

| pH | 濃度及び種類       | 調製方法   |
|----|--------------|--|
| 5  | 0.01M 酢酸緩衝液  | 酢酸アンモニウム 0.077g を水に溶解して 1L とし、酢酸を用いて pH を調整し、4.99 とした。                         |
| 7  | 0.05M リン酸緩衝液 | NaOH296mL 及び 0.1M リン酸一ナトリウム水溶液 500mL を混合し、水で 1L に希釈した。得られた緩衝液の pH は 7.01 であった。 |
| 9  | 0.05M ホウ酸緩衝液 | NaOH213mL 及び 0.1M ホウ酸 0.1M KCl 溶液 500mL を水で 1L に定容した。得られた緩衝液の pH は 9.01 であった。  |

pH7 及び 9 の緩衝液は Tier 1 のみで用いた。

光源： 290nm 以下の波長を遮蔽するフィルターを装着したキセノンランプを用いた。

光強度： 471.2 W/m<sup>2</sup> (波長範囲 300~800 nm)



【試験方法】:

理論的な半減期を確認後 (Tier 1)、pH5 における光分解実験 (Tier 2) を行った。

(1) 理論的な最大半減期 (Tier 1)

の UV-VIS スペクトルからモル吸光係数を求め、北緯 30 度から 50 度における太陽光による光量子照射量を利用して、分解速度定数を求め、さらに理論半減期を求めた。

(2) pH5 緩衝液における光分解実験 (Tier 2)

10.84 mg をメタノール 10mL に溶解して保存溶液を調製した。純度 96.4% を考慮すると 1.05 mg/mL の濃度となる。保存溶液 400  $\mu$ L を滅菌した緩衝液を用いて 420mL に希釈し試験溶液とした。補助溶媒としてのメタノール含量は <0.1% となる。

この試験溶液 100mL を石英ガラス容器に分注した。25°C に設定したサンテスト装置を用いて試験した。暗対照試料は 25°C の気象チャンバー内で暗黒下に試験した。

各試験溶液を 0、1、2、5、8、12、15 日後に 4mL ずつ採取した。各採取時点に、pH の確認を行い、滅菌性の確認は照射開始時と終了時に行った。

|      |           |                     |
|------|-----------|---------------------|
| 試験濃度 | 名目:       | 1.05 mg/L           |
|      | 実測:       | 1.04 mg/L           |
| 試験温度 | 照射試料 実測:  | 平均 24.9 $\pm$ 0.1°C |
|      | 暗対照試料 実測: | 平均 25.0 $\pm$ 0.1°C |
| 補助溶媒 | メタノール     | <0.1%               |

採取した試料は 0.5mL を 9.5mL の水/メタノール/ギ酸/IS\* (78.9/21/0.1/10.35 ng/mL, v/v/v/c) を用いて希釈し一部を LC-MS/MS を用いて定量した。

\*: 安定同位体標識

を内標準 (IS) として用いた。

【結果】

(1) 理論的な最大半減期 (Tier 1)

UV-VIS スペクトルから計算されるモル吸光係数 ( $\epsilon \lambda$ ) 及び北緯 30 度から 50 度の夏における 1 日平均太陽光照射量 ( $L \lambda$ ) から、最大可能性直接光分解速度定数  $K_d$  を求め、この  $K_d$  から半減期を求めた。求められた半減期はいずれも 30 日未満であったため、緩衝液における光分解実験 (Tier2) を実施した。

表 1 最大可能性直接光分解速度定数と半減期

| 緩衝液 |                           | 北緯 40 度 | 北緯 50 度 | 北緯 30 度 |
|-----|---------------------------|---------|---------|---------|
| pH5 | $k_{d(max)}$ [ $d^{-1}$ ] | 115     | 111     | 116     |
|     | $t_{1/2}$ [ $d^{-1}$ ]    | 0.006   | 0.006   | 0.006   |
| pH7 | $k_{d(max)}$ [ $d^{-1}$ ] | 131     | 126     | 132     |
|     | $t_{1/2}$ [ $d^{-1}$ ]    | 0.005   | 0.005   | 0.005   |
| pH9 | $k_{d(max)}$ [ $d^{-1}$ ] | 107     | 103     | 108     |
|     | $t_{1/2}$ [ $d^{-1}$ ]    | 0.006   | 0.007   | 0.006   |

(2) pH5 の緩衝液中における光分解実験 (Tier 2)

25°C、pH5 の緩衝液中における光分解試験をサンテスト装置を用いて連続照射 15 日間すなわち東京 (4-6 月) 換算で 66 日間行ったが、は安定であった。

表 2 pH5 緩衝液光分解におけるジヒドロ体の経時的な量

(処理量に対する% (上段) 及び濃度 (下段))

| 実験条件下<br>東京 (4-6 月) 換算 |       | 0     | 1     | 2     | 5     | 8     | 12    | 15    |
|------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                        |       | 0     | 4     | 8     | 22    | 35    | 53    | 66    |
| 処理量に<br>対する%           | 照射試料  | 104.7 | 101.9 | 103.5 | 106.4 | 107.6 | 108.1 | 107.4 |
|                        | 暗対照試料 | 104.7 | 98.0  | 105.9 | 107.9 | 109.3 | 115.0 | 116.5 |
| 濃度<br>[mg/L]           | 照射試料  | 1.04  | 1.01  | 1.03  | 1.06  | 1.07  | 1.08  | 1.07  |
|                        | 暗対照試料 | 1.04  | 0.98  | 1.05  | 1.07  | 1.09  | 1.14  | 1.16  |

## 5. 土壌吸着性試験

### (1) 土壌吸着-日本土壌 2種

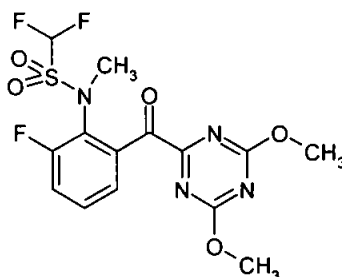
(資料：代-19)

[GLP]

報告書作成年 2012年

供試化合物： [ <sup>14</sup>C ] 標識 トリアファモン

構造：



\* : <sup>14</sup>C 標識位置

化学名： 2'-[(4,6-ジメトキシ-1,3,5-トリアジノン-2-イル)カルボニル]-1,1,6'-トリフルオロ-N-メチルメタンсульホニアリド

放射化学的純度：

化学的純度：

比放射能量：

#### 供試土壌

下記の 2 種の土壌を用いた。風乾し 2 mm の篩を通した各土壌を 0.01M CaCl<sub>2</sub> 水溶液 (HgCl<sub>2</sub> 50 mg/L 含有) を用いて予備平衡化した後、供試した。

表 1 供試土壌の性状

|                         | Ushiku (牛久)      | Kamikawa (上川)   |
|-------------------------|------------------|-----------------|
| 採取場所                    | 茨城県<br>牛久市       | 北海道<br>上川       |
| 土性 (USDA)               | 砂壤土              | 壤土              |
| 砂                       | 63%              | 49%             |
| シルト                     | 26%              | 32%             |
| 粘土                      | 11%              | 19%             |
| 有機炭素含有率                 | 4.3%             | 2.1%            |
| pH (CaCl <sub>2</sub> ) | 5.6              | 4.9             |
| 陽イオン交換容量                | 15.9meq/100g     | 12.2meq/100g    |
| OECD 土壌分類               | No. 2<br>(火山灰土壌) | No. 4<br>(沖積土壌) |

【試験方法】

(1) 予備試験 (表 2、表 3)

3種の土壌-溶液比 1/2、1/4、1/10 で予備試験を実施した。牛久土壌では1/4で吸着率51.0%、上川土壌では1/4で吸着率48.1%であった。吸着率は50%を超えないことが望ましいため、両土壌で1/10の土壌-溶液比が適切であると判断した。平衡化時間は、24時間後に全ての土壌で一定濃度が達成された。

試験溶液中における被験物質が30時間後に安定であること、試験容器表面への吸着が無いことは、4種のEU土壌を用いた吸着・脱着試験(資料 代-20)において確認されている。

各予備試験の結果を以下に示した。

表 2 予備試験：土壌-溶液比による吸着率

|      | 土壌-<br>溶液比 | 溶液中の放射エネルギー<br>[%TAR] | 土壌吸着放射エネルギー<br>[%TAR] | 溶液中のトリアファモン<br>[面積%] |
|------|------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|
| 牛久土壌 | 1/2        | 30.4                  | 69.6                  | 100.0                |
|      | 1/4        | 49.0                  | 51.0                  | 98.6                 |
|      | 1/10       | 73.4                  | 26.6                  | 98.9                 |
| 上川土壌 | 1/2        | 36.8                  | 63.2                  | 100.0                |
|      | 1/4        | 51.9                  | 48.1                  | 97.5                 |
|      | 1/10       | 71.0                  | 29.0                  | 98.2                 |

表 3 予備試験：上清中放射エネルギーの経時変化 (処理放射能に対する%)

|      | 平衡化時間  |      |      |      |
|------|--------|------|------|------|
|      | 0時間    | 6時間  | 24時間 | 48時間 |
| 牛久土壌 | 100.0% | 74.7 | 69.2 | 66.7 |
| 上川土壌 | 100.0% | 75.4 | 72.4 | 72.1 |

0時間は土壌を含まないコントロール試料の測定値

(2) 本試験：

牛久土壌、上川土壌の両土壌とも、土壌-溶液比は1/10 (土壌 2g (乾土重) : 溶液 20mL) とした。予め 0.01M CaCl<sub>2</sub> 水溶液 (HgCl<sub>2</sub> 50 mg/L 含有) 18mL (土壌水分含量で補正) を用いて予備平衡化した土壌に [ <sup>14</sup>C ] トリアファモンを含む 0.01M CaCl<sub>2</sub> 水溶液 (HgCl<sub>2</sub> 50 mg/L 含有) 2mL を添加し、試験濃度 (設定値) として 0.01、0.03、0.1、0.3 及び 1.0 mg/L の 5 濃度で実施した。LSC を用いて測定した実際の処理濃度を表 3 に示した。吸着は暗黒下 25±2°C で 24 時間振とうして行った。

吸着後の試料を遠心分離して上清を調製し、上清中の放射エネルギーを液体シンチレーション

計測 (LSC) により測定した。遠心分離後の土壌は乾燥して燃焼し、捕集した  $^{14}\text{CO}_2$  を LSC で測定した。吸着定数はフロイントリッヒの吸着等温式を用いて計算した。

表 4 試験濃度

|            | mg/L  |       |       |       |       |
|------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 試験濃度設定値    | 0.01  | 0.03  | 0.1   | 0.3   | 1.0   |
| 試験濃度 (実測値) | 0.009 | 0.026 | 0.087 | 0.258 | 1.290 |

【結果】

(1) 物質収支

総物質収支は処理放射能の 94.9 及び 96.4% (平均: 95.6%) の範囲であった。全ての試験系において完全な物質収支が認められた。

24 時間後のトリアファモンの量を上清及び遠心分離後の土壌抽出物で LSC 及び HPLC により求めた。トリアファモンとしての物質収支は牛久土壌で処理放射能の 92.4%、上川土壌で 94.6% (平均: 93.5%) であり、当試験におけるトリアファモンの安定性も確認された。

表 5 放射能量としての回収率 (処理放射能に対する%)

|     | 牛久土壌  | 上川土壌  |
|-----|-------|-------|
| 回収率 | 94.9% | 96.4% |

5 濃度の平均値

表 6 トリアファモンの物質収支

|                       | 牛久土壌 | 上川土壌 |
|-----------------------|------|------|
| 上清中の回収放射能 [%TAR]      | 58.2 | 65.6 |
| 上清中のトリアファモン [面積%]     | 98.0 | 98.5 |
| 上清中のトリアファモン回収率 [%TAR] | 57.0 | 64.6 |
| 土壌中の回収放射能 [%TAR]      | 36.3 | 30.6 |
| 土壌中のトリアファモン [面積%]     | 97.6 | 97.9 |
| 土壌中のトリアファモン回収率 [%TAR] | 35.4 | 30.0 |
| 放射能の総回収率 [%TAR]       | 94.5 | 96.2 |
| トリアファモンの総回収率 [%TAR]   | 92.4 | 94.6 |

(2) 吸着定数

フロイントリッヒ等温式の $K_F^{ads}$ 吸着定数は牛久と上川でそれぞれ、4.259及び3.916mL/g (平均:4.087mL/g)であった。フロイントリッヒの乗数 $1/n$ は0.8851及び0.9841 (平均:0.9346)であり、実験した濃度範囲における吸着挙動に被験物質の濃度が影響することを示している。 $K_F^{ads}_{oc}$ は99.0及び186.5mL/g (平均:142.7mL/g)であった。

$K_F^{ads}$ 及び $K_F^{ads}_{oc}$ の結果から、トリアファモンの土壌中における移動性は低いと考えられる。

表7 トリアファモンの吸着定数

|            | $K_F^{ads}$<br>[mL/g] | $1/n$  | $R^2$  | $K_F^{ads}_{oc}$<br>[mL/g] |
|------------|-----------------------|--------|--------|----------------------------|
| 牛久土壌 (火山灰) | 4.259                 | 0.8851 | 0.9997 | 99.0                       |
| 上川土壌 (沖積)  | 3.916                 | 0.9841 | 0.9993 | 186.5                      |
| 平均         | 4.087                 | 0.9346 | 0.9995 | 142.7                      |

(2) 土壌吸着/脱着試験-4種 EU 土壌

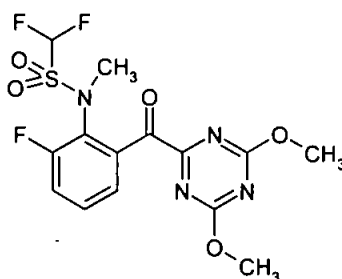
(資料 代-20)

[GLP]

報告書作成年 2012年

供試化合物: [ <sup>14</sup>C ] トリアファモン

構造:



\* : <sup>14</sup>C 標識位置

化学名: 2'-[(4,6-ジメチル-1,3,5-トリアジソン-2-イル)カルボニル]-1,1,6'-トリフルオロ-N-メチルメタンсульホニアニド

放射化学的純度:

化学的純度:

比放射能量:

供試土壌

下記の4種の土壌を用いた。風乾し2mmの篩を通した各土壌を0.01M CaCl<sub>2</sub>水溶液(HgCl<sub>2</sub> 50 mg/L含有)を用いて予備平衡化した後、供試した。

表1 供試土壌の性状

|                         | Laacher Hof<br>AXXa 土壌<br>(略号: AX) | Dollendorf II<br>土壌<br>(略号: DD) | Laacher Hof<br>Wurmweise 土壌<br>(略号: WW) | Hoefchen am<br>Hohenseh 4a 土<br>壌 (略号: HH) |
|-------------------------|------------------------------------|---------------------------------|---|--|
| 採取場所                    | Monheim /<br>ドイツ                   | Blankenheim/<br>ドイツ             | Monheim/<br>ドイツ                         | Burscheid/<br>ドイツ                          |
| 土性(USDA)                | 砂壤土                                | 壤土                              | 砂壤土                                     | シルト質壤土                                     |
| 砂                       | 75%                                | 35%                             | 55%                                     | 25%  |
| シルト                     | 19%                                | 41%                             | 29%                                     | 61%  |
| 粘土                      | 6%                                 | 24%                             | 16%                                     | 14%  |
| 有機炭素含有率                 | 2.1%                               | 4.7%                            | 2.0%                                    | 2.3%                                       |
| pH (CaCl <sub>2</sub> ) | 6.1                                | 7.1                             | 5.2                                     | 6.3  |
| 陽イオン交換容量                | 9.6 meq/100g                       | 21.2 meq/100g                   | 10.7 meq/100g                           | 14.5 meq/100g                              |
| OECD 土壌分類*              | No. 3 または 5<br>に類似                 | No. 2 に類似                       | No. 5 に類似                               | No. 3 に類似                                  |

\*申請者記載

## 【試験方法】

### (1) 予備試験

被験物質の安定性：

土壌を含まない 0.01M  $\text{CaCl}_2$  溶液 (50 mg/L の  $\text{HgCl}_2$  含有) 中の被験物質濃度を 30 時間後に確認した。

試験容器への被験物質の吸着の有無：

テフロン製の試験容器への吸着の有無を確認した。

土壌/溶液 比：

4 種の土壌各 1、2、5g (乾土重) と 0.01M  $\text{CaCl}_2$  溶液 ( $\text{HgCl}_2$  50 mg/L 含有) 20mL を混合し (土壌溶液比 1/20、1/10、1/4)、被験物質溶液を添加して、24 時間振とうした後に、LSC 及び HPLC を用いて被験物質濃度を確認し、最適な土壌溶液比を求めた。

平衡化時間：

土壌 2g または 5g に 20mL の 0.01M  $\text{CaCl}_2$  溶液 ( $\text{HgCl}_2$  50 mg/L 含有) を混合し、処理溶液を添加して、振とうし、6、24、48 時間後に遠心分離して、上清中の放射エネルギーを測定し、平衡化時間を決定した。

### (2) 本試験

AX 土壌、WW 土壌及び HH 土壌では土壌-溶液比 1:4、DD 土壌では 1:10 を用いた。予め 0.01M  $\text{CaCl}_2$  水溶液 ( $\text{HgCl}_2$  50 mg/L 含有) 18mL (土壌水分含量で補正) を用いて予備平衡化した土壌に [  $^{14}\text{C}$  ] トリアファモンを含む 0.01M  $\text{CaCl}_2$  水溶液 ( $\text{HgCl}_2$  50 mg/L 含有) 2mL を添加し、試験濃度 (設定値) として 0.01、0.03、0.1、0.3 及び 1.0 mg/L で実施した。LSC を用いて測定した実際の処理濃度を表 2 に示した。脱着段階は、被験物質を含まない 0.01M  $\text{CaCl}_2$  水溶液 ( $\text{HgCl}_2$  50 mg/L 含有) と予め吸着した土壌を用いて、脱着サイクルを 1 回行った。吸着及び脱着サイクルは暗黒下  $20 \pm 2^\circ\text{C}$  で各々 24 時間振とうして行った。

吸着及び脱着後の試料を遠心分離して上清を調製し、上清中の放射エネルギーを液体シンチレーション計測 (LSC) により分析した。脱着終了後、土壌は乾燥して燃焼し、捕集した  $^{14}\text{CO}_2$  を LSC で測定した。吸着定数はフロイントリッヒの吸着等温式を用いて計算した。



表 2 試験濃度

| 設定値        | mg/L  |       |       |       |       |
|------------|-------|-------|-------|-------|-------|
|            | 0.01  | 0.03  | 0.1   | 0.3   | 1.0   |
| 試験濃度 (実測値) | 0.010 | 0.029 | 0.096 | 0.287 | 1.143 |

【結果】

(1) 予備試験

試験溶液中における被験物質は 30 時間後に処理放射能の 101.3%が回収され安定であり、試験容器表面への被験物質吸着は無かった。土壌-溶液比は、AX、WW、HH 土壌で 1 対 4 (吸着率 29.9~37.4%)、DD 土壌で 1 対 10 (吸着率 30.6%) が適切であった。平衡化時間は、24 時間後に全ての土壌で一定濃度が達成された。

各予備試験の結果を以下に示した。

表 3 土壌-溶液比による吸着率の変化

|       | 土壌-<br>溶液比 | 溶液中の<br>放射能量<br>[%AR] | 土壌吸着<br>放射能量<br>[%AR] | 溶液中の<br>トリアファモン<br>[面積%] |
|-------|------------|-----------------------|-----------------------|--------------------------|
| AX 土壌 | 1/4        | 68.5                  | 31.5                  | 96.9                     |
|       | 1/10       | 85.4                  | 14.6                  | 96.6                     |
|       | 1/20       | 91.6                  | 8.4                   | 95.7                     |
| DD 土壌 | 1/4        | 46.4                  | 53.6                  | 93.7                     |
|       | 1/10       | 69.4                  | 30.6                  | 94.7                     |
|       | 1/20       | 83.0                  | 17.0                  | 96.5                     |
| WW 土壌 | 1/4        | 70.1                  | 29.9                  | 97.6                     |
|       | 1/10       | 83.4                  | 16.6                  | 97.4                     |
|       | 1/20       | 91.4                  | 8.6                   | 97.8                     |
| HH 土壌 | 1/4        | 62.6                  | 37.4                  | 97.9                     |
|       | 1/10       | 81.8                  | 18.2                  | 97.9                     |
|       | 1/20       | 90.2                  | 9.8                   | 97.0                     |

表 4 予備試験における上清中放射能量の経時変化 (処理放射能に対する%)

|       | 平衡化時間 |       |       |
|-------|-------|-------|-------|
|       | 0 時間  | 6 時間  | 24 時間 |
| AX 土壌 | 100%  | 68.8% | 68.5% |
| DD 土壌 | 100%  | 74.3% | 69.4% |
| WW 土壌 | 100%  | 71.9% | 70.1% |
| HH 土壌 | 100%  | 66.3% | 62.6% |

(2) 本試験

物質収支 (表 5、表 6)

総物質収支は処理放射能の 94.5 から 98.3% (平均: 96.0%) の範囲であった。全ての試験系において完全な物質収支が認められた。

48 時間後のトリアファモンの量を上清及び遠心分離後の土壌抽出物で LSC 及び HPLC により求めた。全ての土壌について、トリアファモンの物質収支は処理放射能の 94.2 から 100.9% の範囲 (平均: 98.7%) であり、良好であった。

表 5 吸着及び脱着後の総放射能回収率 (処理放射能に対する%)

|     | AX 土壌 | DD 土壌 | WW 土壌 | HH 土壌 |
|-----|-------|-------|-------|-------|
| 回収率 | 95.2% | 95.5% | 96.9% | 96.4% |

表 6 トリアファモンとしての物質収支

|                      | AX 土壌 | DD 土壌 | WW 土壌 | HH 土壌 |
|----------------------|-------|-------|-------|-------|
| 上清中の回収放射能 [%AR]      | 61.3  | 60.0  | 60.2  | 54.7  |
| 上清中のトリアファモン [面積%]    | 98.2  | 93.4  | 97.7  | 97.3  |
| 上清中のトリアファモン回収率 [%AR] | 60.3  | 56.1  | 58.8  | 53.3  |
| 土壌中の回収放射能 [%AR]      | 40.7  | 39.2  | 41.3  | 48.3  |
| 土壌中のトリアファモン [面積%]    | 97.6  | 97.2  | 98.9  | 98.7  |
| 土壌中のトリアファモン回収率 [%AR] | 39.7  | 38.1  | 40.9  | 47.7  |
| 放射能の総回収率 [%AR]       | 102.1 | 99.2  | 101.5 | 103.0 |
| トリアファモンの総回収率 [%AR]   | 100.0 | 94.2  | 99.7  | 100.9 |

吸着定数及び脱着定数

フロイントリッヒ等温式の  $K_F^{ads}$  吸着定数は4種の土壌で1.715から4.712mL/gの範囲 (平均: 2.745mL/g) であった。フロイントリッヒの乗数  $1/n$  は0.9081から0.9292の範囲 (平均: 0.9204) であり、実験した濃度範囲における吸着挙動に被験物質の濃度が影響することを示している。 $K_F^{ads}$  は85.8から104.9mL/gの範囲 (平均: 98.2mL/g) であった。土壌pHと吸着の間に関係性は認められなかった。

$K_F^{ads}$  及び  $K_F^{ads} \alpha_c$  の値から、トリアファモンは土壌において中間的な移動性を持つと考えられた。

表7 トリアファモンの吸着定数

|       | $K_F^{ads}$<br>[mL/g] | 1/n    | $R^2$  | $K_F^{ads_{oc}}$<br>[mL/g] |
|-------|-----------------------|--------|--------|----------------------------|
| AX 土壌 | 2.140                 | 0.9292 | 0.9971 | 101.9                      |
| DD 土壌 | 4.712                 | 0.9081 | 0.9993 | 100.3                      |
| WW 土壌 | 1.715                 | 0.9197 | 0.9996 | 85.8                       |
| HH 土壌 | 2.412                 | 0.9247 | 0.9989 | 104.9                      |
| 平均    | 2.745                 | 0.9204 | 0.9987 | 98.2                       |

脱着段階の最後において、Laacher Hof AXXa 土壌、Dollendorf II 土壌、Laacher Hof Wurmwielse 土壌、及び Hoefchenam Hohenseh 4 a 土壌それぞれにおいて、初期吸着量の 40.2-45.4%、41.9-48.3%、43.6-49.8%及び 37.6-45.6%が脱着した。

フロイントリッヒ等温式の脱着定数 $K_F^{des}$ は、4種土壌で、3.740から9.788の範囲（平均：5.685mL/g）、乗数1/nは0.9334から0.9687の範囲（平均：0.9482）であった。土壌の $K_F^{des_{oc}}$ は187.0から222.7mg/g（平均：203.8mL/g）であった。

脱着定数 $K_F^{des}$ はそれぞれの吸着定数よりおよそ2倍高く、土壌に一度吸着した被験物質の結合はより強いことを示している。

$K_F^{des}$ 及び $K_F^{des_{oc}}$ の値から、一旦土壌に吸着されたトリアファモンの再移動性は低いと考えられる。

表8 トリアファモンの脱着定数

|       | $K_F^{des}$<br>[mL/g] | 1/n    | $R^2$  | $K_F^{des_{oc}}$<br>[mL/g] |
|-------|-----------------------|--------|--------|----------------------------|
| AX 土壌 | 4.677                 | 0.9687 | 0.9984 | 222.7                      |
| DD 土壌 | 9.788                 | 0.9422 | 0.9995 | 208.3                      |
| WW 土壌 | 3.740                 | 0.9485 | 0.9991 | 187.0                      |
| HH 土壌 | 4.535                 | 0.9334 | 0.9990 | 197.2                      |
| 平均    | 5.685                 | 0.9482 | 0.9990 | 203.8                      |

(3) の土壤吸着-4種土壤

(資料 代-21)

[GLP 対応]

報告書作成年 2012年

供試化合物： [  $^{14}\text{C}$  ]

構造：

\* :  $^{14}\text{C}$  標識位置

化学名：

放射化学的純度：

化学的純度：

比放射能量：

供試土壤

下記の4種の土壤を用いた。風乾し2mmの篩を通した各土壤を0.01M  $\text{CaCl}_2$ 水溶液を用いて予備平衡化した後、供試した。

表 供試土壤の性状

|                        | Laacher Hof<br>Wurmweise 土壤<br>(略号：WW)         | Hoefchen am<br>Hohenseh 土壤<br>(略号：HH)            | Ushiku (牛久)      | Kamikawa (上川)   |
|------------------------|--|--|------------------|-----------------|
| 採取場所                   | Monheim/<br>North Rhine-<br>Westphalia/<br>ドイツ | Burscheid/<br>North Rhine-<br>Westphalia/<br>ドイツ | 茨城県<br>牛久市       | 北海道<br>上川       |
| 土性(USDA)               | 砂壤土  | シルト質壤土   | 砂壤土              | 壤土              |
| 砂                      | 53%  | 15%  | 63%              | 49%             |
| シルト                    | 30%  | 70%  | 26%              | 32%             |
| 粘土                     | 17%  | 15%  | 11%              | 19%             |
| 有機炭素含有率                | 1.8%   | 1.6%   | 4.3%             | 2.1%            |
| pH ( $\text{CaCl}_2$ ) | 5.1  | 6.2  | 5.6              | 4.9             |
| 陽イオン交換容量               | 10.9 meq/100g                                  | 11.7 meq/100g                                    | 15.9 meq/100g    | 12.2 meq/100g   |
| OECD 土壤分類*             | No. 5 に類似                                      | No. 3 に類似  | No. 2<br>(火山灰土壤) | No. 4<br>(沖積土壤) |

\*申請者記載

【試験方法】

(1) 予備試験

予備試験を実施した。土壌なしのコントロール試料において被験物質は7日後に処理放射能の $\geq 98.1\%$ が回収され安定であり、試験容器表面への被験物質吸着は無かった。土壌-溶液比は、WW、HH土壌で1/1(吸着率48.5~51.9%)、牛久土壌で1/4(吸着率42.2%)、上川土壌で1/2(吸着率49.0%)、が適切であった。平衡化時間は、48時間後に全ての土壌で一定濃度が達成された。

各予備試験の結果を以下に示した。

表1 土壌-溶液比による吸着率の変化

|       | 土壌-<br>溶液比          | 溶液中の放射能量<br>[%AR] | 土壌吸着放射能量<br>[%AR] | 溶液中の<br>[%面積] |
|-------|---------------------|-------------------|-------------------|---------------|
| WW 土壌 | 5/20                | 81.0              | 19.0              | 99.1          |
|       | 10/20               | 67.7              | 32.3              | 99.1          |
|       | 20/20               | 51.5              | 48.5              | 99.3          |
| HH 土壌 | 5/20                | 79.7              | 20.3              | 99.1          |
|       | 10/20               | 65.1              | 34.9              | 99.3          |
|       | 20/20               | 48.1              | 51.9              | 99.6          |
| 牛久土壌  | 5/20                | 57.8              | 42.2              | 98.9          |
|       | 10/20               | 38.9              | 61.1              | 100.0         |
|       | 20/25 <sup>1)</sup> | 26.8              | 73.2              | 98.8          |
| 上川土壌  | 5/20                | 68.2              | 31.8              | 98.9          |
|       | 10/20               | 51.0              | 49.0              | 98.9          |
|       | 20/20               | 35.1              | 64.9              | 100.0         |

1) 牛久土壌 20g に対しては、懸濁するためには溶液 25mL が必要であった。

表2 予備試験における上清中放射能量の経時変化 (処理放射能に対する%)

|       | 平衡化時間 |      |       |       |       |
|-------|-------|------|-------|-------|-------|
|       | 0 時間  | 6 時間 | 24 時間 | 48 時間 | 72 時間 |
| WW 土壌 | 100.0 | 54.8 | 50.7  | 48.4  | 47.2  |
| HH 土壌 | 100.0 | 51.4 | 47.2  | 44.3  | 43.4  |
| 牛久土壌  | 100.0 | 62.8 | 55.7  | 52.2  | 50.0  |
| 上川土壌  | 100.0 | 54.9 | 51.5  | 49.0  | 49.1  |

(2) 本試験

吸着実験は、土壌-溶液比 1/1 (Laacher Hof Wurmwiase 土壌及び Hoefchen am Hohenseh 土壌)、1/2 (上川土壌)、及び 1/4 (牛久土壌) で、0.01M CaCl<sub>2</sub> 水溶液で平衡化した風乾土壌を用いて実施した。を 0.01M CaCl<sub>2</sub> 水溶液中の名目濃度 0.01、0.03、0.1、0.3、1.0 mg/L で処理した。温度 24.7~25.2°C (平均 24.9°C) で吸着時間は 48 時間とした。

吸着後の試料を遠心分離して上清を調製し、上清中の放射エネルギーを液体シンチレーション計測 (LSC) により分析した。脱着終了後、土壌は乾燥して燃焼し、捕集した <sup>14</sup>CO<sub>2</sub> を LSC で測定した。吸着定数はフロイントリッヒの吸着等温式を用いて計算した。

【結果】

(1) 物質収支

総物質収支は処理放射能の 100.1 から 101.4% (平均: 100.8%) の範囲であった。全ての試験系において完全な物質収支が認められた。

72 時間後のトリアファモンの量を上清及び遠心分離後の土壌抽出物で LSC 及び HPLC により求めた。全ての土壌について、トリアファモンの物質収支は処理放射能の 95.1 から 98.6% の範囲 (平均: 96.6%) であり、良好であった。

表 3 放射能の全回収率

|            | WW 土壌 | HH 土壌 | 牛久土壌  | 上川土壌  |
|------------|-------|-------|-------|-------|
| 回収率<br>%AR | 100.6 | 101.4 | 100.1 | 101.2 |

表 4 の物質収支

|                 | WW 土壌 | HH 土壌 | 牛久土壌 | 川上土壌 |
|-----------------|-------|-------|------|------|
| 上清中の回収放射能 [%AR] | 28.9  | 27.1  | 38.0 | 37.7 |
| 上清中の [面積%]      | 98.3  | 98.6  | 98.8 | 99.2 |
| 上清中の 回収率 [%AR]  | 28.4  | 26.7  | 37.6 | 37.4 |
| 土壌中の回収放射能 [%AR] | 69.1  | 70.4  | 58.6 | 62.0 |
| 土壌中の [面積%]      | 97.9  | 99.2  | 98.1 | 98.6 |
| 土壌中の 回収率 [%AR]  | 67.7  | 69.8  | 57.5 | 61.2 |
| 放射能の総回収率 [%AR]  | 98.0  | 97.5  | 96.6 | 99.7 |
| の総回収率 [%AR]     | 96.1  | 96.5  | 95.1 | 98.6 |

(2) 吸着定数

フロイントリッヒ等温式の $K_F^{ads}$ 吸着定数は4種の土壌で0.886から1.226mL/gの範囲（平均：1.046mL/g）であった。フロイントリッヒの乗数 $1/n$ は0.8923から0.9586の範囲（平均：0.9314）であり、実験した濃度範囲における吸着挙動に被験物質の濃度が影響することを示している。 $K_{oc}(ads)$ は20.6から76.6mL/gの範囲（平均：51.1mL/g）であった。土壌pHと吸着の間に関係性は認められなかった。

$K_F^{ads}$ 及び $K_F^{ads}_{oc}$ の値から、 $K_F^{ads}$ は土壌において中間的な移動性～移動性を持つと考えられた。

表 5  $K_F^{ads}$  の吸着定数

|       | $K_F^{ads}$<br>[mL/g] | $1/n$  | $R^2$  | $K_F^{ads}_{oc}$<br>[mL/g] |
|-------|-----------------------|--------|--------|----------------------------|
| WW 土壌 | 1.059                 | 0.9463 | 0.9994 | 58.8                       |
| HH 土壌 | 1.226                 | 0.9286 | 0.9996 | 76.6                       |
| 牛久土壌  | 0.886                 | 0.8923 | 0.9992 | 20.6                       |
| 上川土壌  | 1.015                 | 0.9586 | 0.9999 | 48.3                       |
| 平均    | 1.046                 | 0.9314 | 0.9995 | 51.1                       |

## 代謝・動態のまとめ

トリアファモンの動物、植物、土壌、水中における代謝、分解、残留の要約は下記のとおりであり、代謝分解経路を代-153 頁に、結果の概要を代-154 頁に示した。

### 動物（ラット）：

を  $^{14}\text{C}$  標識した 2 種のトリアファモンを用いて、試験を実施した。標識位置、低用量 (2 mg/kg 体重)、高用量 (200 mg/kg 体重) 及び雌雄に関わらず、投与した放射能は約 80% (77~87%) が尿から排泄され、糞から約 10~25% が排泄された。雄で糞中の放射エネルギーがわずかに 20% を超えたため、胆汁試験を実施し、約 25% が胆汁中に認められた。吸収率は約 76~96% であると考えられた。

血漿中の放射能濃度は低用量では 0.33~0.67 時間後に約 3 及び 1.5 mg/kg の最大血漿中濃度となり、24 時間以内に最大値の 1% 未満に減少した。高用量では 4 時間後に約 159 または 66 mg/kg の最大濃度となり、32 時間以内に最大値の 1% 未満に減少した。

排泄物中の最も主要な代謝物として

が認められた。その他に 10% 以上の代謝物として

が認められた。

投与 1 時間後までには全ての臓器及び組織で最大濃度が認められた。多くの臓器及び組織での濃度は血液中の濃度より低かったが、肝臓及び腎臓では、血液より約 2 倍高かった。ラット臓器・組織の放射能濃度は、微量の放射能が検出された肝臓 (0.008  $\mu\text{g/g}$ ) 及び腎臓 (0.009  $\mu\text{g/g}$ ) を除き、7 日後 (168 時間後) までに定量限界未満に減少した。

### 植物（水稻）：

標識位置の異なる 2 種の  $^{14}\text{C}$  標識トリアファモンを用いて、水稻に対して水面処理 1 回あるいは水面処理 1 回 + 散布処理 1 回で試験を実施した。溢泌液、青刈りの茎葉、わら、もみがら、玄米試料を分析した。1 回処理における玄米の総放射能残留量は 0.014~0.027 mg/kg、もみがらは 0.182~0.199 mg/kg、わらは 1.016~1.304 mg/kg、青刈りの茎葉で 0.198~0.334 mg/kg であり、2 回処理ではその約 2~3 倍の残留が認められた。

トリアファモンの他に

の 5 種の代謝物が各試料から同

定された。

1 回処理の玄米における主代謝物は

であった。わらでは



が10%以上の主代謝物であった。

家畜（ヤギ、鶏）：

を<sup>14</sup>C標識した2種のトリアファモンを用いて、泌乳ヤギ及び産卵鶏における代謝試験を実施した。

泌乳ヤギへ33.25または29.26 mg/kg 乾燥飼料/日に相当する1.0 mg/kg体重で5日間経口投与した結果、乳汁への排泄量は総投与量の約0.04%（平均0.010 mg/kg）であり、可食部組織への残留量は約0.18%または約0.40%であった。残留濃度は肝臓で約0.3~0.6 mg/kg、腎臓 約0.2~0.3 mg/kg、脂肪約0.03 mg/kg、筋肉 約0.006~0.02 mg/kgであり、肝臓・腎臓で高く、乳汁及び筋肉では低かった。

6種の代謝物が同定され、そのうちでもっとも主要な代謝物は  
であった。

産卵鶏において、17.51または18.42 mg/kg 乾燥飼料/日に相当する約1 mg/kg体重で14日間投与した結果、卵への排泄量は総投与量の約0.05%（平均0.016~0.017 mg/kg）、可食部組織への残留量は約0.09%であった。残留濃度は腎臓で約0.2 mg/kg、肝臓で約0.08~0.09 mg/kg、皮膚約0.03~0.04 mg/kg、脂肪約0.03 mg/kg、筋肉0.01 mg/kgであり、腎臓・肝臓で高く、卵及び筋肉では低かった。

5種の代謝物が同定され、そのうちで最も主要な代謝物は  
であった。

土壌（好気湛水、好気）：

<sup>14</sup>C標識した2種のトリアファモンを用いて、好気的湛水及び好気的土壌中動態試験を実施した。

好気的湛水土壌中における代謝物は  
が最も多く、その他に  
が10%以上認められた。二酸化炭素は3.3または21.2%認められ、揮発性有機化合物は認められなかった。トリアファモンのDT<sub>50</sub>は5.1または6.0日、DT<sub>90</sub>は17または20日であった。

4種の好気土壌においてトリアファモンは非常に速やかに分解しDT<sub>50</sub>は0.3~0.6日、DT<sub>90</sub>は1.0~2.1日であった。二酸化炭素は120日後において16.1~56.4%認められ、揮発性有機化合物は認められなかった。10%を超える6種の代謝物が検出され、

と同定され

た。 も速やかに分解した。

水中：

を  $^{14}\text{C}$  標識した 2 種のトリアファモンを用いて、加水分解（緩衝液）、及び水中光分解（緩衝液及び河川水）を試験した。代謝物についても加水分解及び水中光分解試験を実施した。

トリアファモンの 25°C における加水分解の  $\text{DT}_{50}$  は pH4 で 1 年以上、pH7 で 118 または 153 日、pH9 で 2.4 日であり、酸性条件で安定、アルカリ性条件で不安定であった。主分解物は であつた。

トリアファモンの緩衝液 (pH5) 中における光分解では、10 日後に 65% まで分解したが、主分解物は認められず、5% 未満の少量代謝物が多数生成した。実験条件下における  $\text{DT}_{50}$  は 15.8 または 14.8 日、東京 (4-6 月) 換算では 117.4 日または 107.6 日であつた。

滅菌河川水 (pH8.5 または 8.2) における光分解では、トリアファモンは 4.25 日の連続照射で 23.3% に減少し、 が 16.5%、 が 5.3%、

が 5.8%、及び  $\text{CO}_2$  が 3.3% 認められた。これに対して暗対照では分解物として が認められ、光照射条件下では は速やかに光分解すると考えられた。トリアファモンの  $\text{DT}_{50}$  は実験条件下で 1.7 または 1.9 日、東京 (4-6 月) 換算で 12.6 または 14.2 日であり、暗対照の  $\text{DT}_{50}$  は 1.3 または 1.8 日であつた。

土壌吸着：

トリアファモン (日本土壌 2 種及び EU 土壌 4 種) 及び、代謝物 (日本土壌 2 種及び EU 土壌 2 種) を用いた土壌吸着試験を実施した。

トリアファモンの各土壌における有機炭素量で補正した吸着定数  $K_{\text{F}}^{\text{ads}}_{\text{OC}}$  は 85.8~186.5 mL/g の範囲であり、中程度の移動性であつた。EU 土壌では脱着試験が実施され、一旦土壌に吸着された後の移動性は低いと考えられた。

の吸着定数  $K_{\text{F}}^{\text{ads}}_{\text{OC}}$  は 20.6~76.6 mL/g の範囲であり、中間的な移動性~移動性を持つと考えられた。

## トリアファモンの動植物などにおける代謝分解経路図

| 代謝分解物     |            | トリア<br>ファモン | M1        | M2          | M3      | M4   | M5 | M6 | M7 | M8 | M9 | M10 | M11 | M12 | M13 | M14 | M15 | M16 | M17 | M18 | M19 | M20 | M21 | 未測定 | CO2 | 未抽出 | 回収放射<br>線の合計 | 投与量に<br>対する回<br>収率(%) |         |
|-----------|------------|-------------|-----------|-------------|---------|------|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|--------------|-----------------------|---------|
| 動物        | ラット        | 雄           | 尿         | -           |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | -   | 80.22        |                       |         |
|           |            | 雌           | 尿         | 0.07        |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 19.98                 |         |
|           |            | 雄           | 尿         | 0.15        |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 81.02                 |         |
|           |            | 雌           | 糞         | 1.18        |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 11.37                 |         |
|           |            | 雄           | 胆汁        | 0.05        |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              |                       | 75.96   |
|           |            |             |           |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | 23.46        |                       |         |
| 植物        | フェニル<br>環  | 1           | わら        | %           | 2.6     |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | 3.6 | 100          |                       |         |
|           |            |             | 玄米        | mg/kg       | (0.027) |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | (0.037)      | (1.018)               |         |
|           |            | 2           | わら        | %           | 18.2    |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | 9.2          | 100                   |         |
|           |            |             | 玄米        | mg/kg       | (0.808) |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | (0.307)      | (3.342)               |         |
|           | トリアジン<br>環 | 1           | わら        | %           | 2.6     |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | 9.0          | 100                   |         |
|           |            |             | 玄米        | mg/kg       | (0.034) |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | (0.117)      | (1.304)               |         |
|           | 2          | わら          | %         | 15.0        |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | 8.6          | 100                   |         |
|           |            | 玄米          | mg/kg     | (0.784)     |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | (0.438)      | (5.1)                 |         |
|           | 家畜         | フェニル<br>環   | 乳         | %           |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 1.8                   | 100.0   |
|           |            |             | 筋肉        | mg/kg       |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | (<0.001)              | (0.010) |
| 肝臓        |            |             | %         |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | 3.9          | 100                   |         |
| 腎臓        |            |             | mg/kg     |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | (0.012)      | (0.299)               |         |
| フェニル<br>環 |            | 卵           | %         |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 1.4                   | 100.0   |
|           |            | 筋肉          | mg/kg     |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | (0.002)      | (0.167)               |         |
| 2         |            | 卵           | %         |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 13.1                  | 100.0   |
|           |            | 筋肉          | mg/kg     |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | (0.001)      | (0.010)               |         |
| 脂肪        |            | 肝臓          | %         |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 21.4                  | 100     |
|           |            | 脂肪          | mg/kg     |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | (0.017)               | (0.078) |
| 土壌        | 好気<br>浸水   | フェニル<br>環   | 水+土壌      | 6日後         | 49.8    |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 101.4                 |         |
|           |            | 182日後       | 1.6       |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 103.7                 |         |
|           | 好気         | フェニル<br>環   | 3日後       | 4.8         |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              |                       | 99.7    |
|           |            | 64日後        | <LOD      |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              |                       | 97.1    |
|           |            | 126日後       | n.d.      |             |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              |                       | 98.5    |
| 水中        | 加水分解       | 緩衝液         | フェニル<br>環 | 25°C<br>pH7 | 30日後    | 84.1 |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 99.6                  |         |
|           |            | 25°C<br>pH9 | 2日後       | 58.3        |         |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              | 100.3                 |         |
|           | 水中光分解      | 緩衝液         | フェニル<br>環 | 25°C<br>pH5 | 10日後    | 85.4 |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              |                       | 101.5   |
|           |            | 自然水         | 25°C      | 2.25日後      | 40.1    |      |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |              |                       | 99.2    |

\* 代謝物M12を含む。

