

## 5.オクタノール/水分配係数

### 【項目】 オクタノール/水分配係数

表 オクタノール/水分配係数の規格一覧（対比する規格があるフラスコ振とう法と HPLC 法について、比較表を作成した）

方法	OECD	EU	EPA
フラスコ振とう法	107 分配係数 (n-オクタノール/水) : フラスコ振とう法	A8 分配係数	830.7550 分配係数 (n-オクタノール/水)、フラスコ振とう法
高速液体クロマトグラフィー(HPLC)法	117 n-オクタノール/水分配係数—高速液体クロマトグラフィー (HPLC) 法		830.7570 分配係数 (n-オクタノール/水)、液体クロマトグラフィーによる推算
ジェネレーターカラム法			830.7860 分配係数 (n-オクタノール/水)、ジェネレーターカラム法
低速攪拌法	123 分配係数 (n-オクタノール/水) : 低速攪拌法		

OECD123 ; 低速攪拌法は、 $\log Pow \leq 8.2$  まで測定を可能としたもの。

EPA830.7560 ; ジェネレーターカラム法は、7860 (水溶解性) のプレテストとして策定されているもの。

5.オクタノール/水分配係数

1. フラスコ振とう法

試験法	OECD	EU	EPA	条件の違いが結果に与える影響の考察	
試験法 No	107	A08	830.7550		
試験法名称	分配係数 (n-オクタノール/水) : フラスコ振とう法	分配係数	分配係数 (n-オクタノール/水)、フラスコ振とう法		
適用範囲	logPow -2~4 の物質 界面活性のある物質は適用外。	logPow -2~4 の物質。水とオクタノールに溶解するもの。高純度の物質。	純度があり、解離や結合をしない、また界面活性のない水溶性物質。非水溶性物質 ( $\rho > 10^6 \text{g/L}$ ) は適用外。		
被験物質に関すること	解離定数、水溶解度、加水分解性、表面張力、n-オクタノール溶解性	解離定数、水溶解度、加水分解性、表面張力、n-オクタノール溶解性	記載なし		
試験条件	n-オクタノール	分析用試薬。試験前に水で飽和させる。	分析グレード。試験前に水で飽和させる。		
	水	蒸留水または再蒸留水。イオン交換水は用いない。試験前に n-オクタノールで飽和させる。	蒸留水または再蒸留水。試験前に n-オクタノールで飽和させる。		
	被験物質濃度	水で飽和させた n-オクタノールで既知濃度溶液を調整する。 ① 予備実験から考慮、分析で検出できる最小濃度、両液相中で 0.01mol/L を超えない ② 容積比①の半分 ③ 容積比①の倍	水で飽和させた n-オクタノールで既知濃度溶液を調整する。 ① 予備実験から考慮、分析で検出できる最小濃度、両液相中で 0.01mol/L を超えない ② 容積比①の半分 ③ 容積比①の倍	水で飽和させた n-オクタノールで既知濃度溶液を調整する。 ① 予備実験から考慮、分析で検出できる最小濃度、両液相中で 0.01mol/L を超えない ② 容積比①の半分 ③ 容積比①の倍	
	基準物質	必要としない	必要としない	必要としない	
	試験温度 (°C)	20-25±1°C	20-25±1°C	20-25±1°C	各国規格における常温や室温の定義の違いを受け入れたものと推測。5°Cの差はあるも、結果は対数なので影響は殆ど無いと推測。
	分配平衡	両液で試験容器にほぼ一杯にする。	両液で試験容器にほぼ一杯にする。	両液で試験容器にほぼ一杯にする。	
	振とう	手または振とう機 (推奨) 100 回転/5 分で振とうする	手または振とう機 (推奨) 100 回転/5 分で振とうする	手または振とう機 (推奨) 100 回転/5 分で振とうする	
	相分離	1hr 放置	1hr 放置	1hr 放置	
結果の表記	logPow	logPow	logPow		
報告内容	被験物質、試験条件、使用した試薬類の詳細。分析法。	被験物質、試験条件、使用した試薬類の詳細。分析法。	被験物質、試験条件、使用した試薬類の詳細。分析法。		
試験の精度に関すること	N=2 で実施。全 6 データ(logPow)は ±0.3 以内。	N=2 で実施。全 6 データ(logPow)は ±0.3 以内。	N=2。全 6 データの結果は ±0.3 以内。		

5.オクタノール/水分配係数

2. HPLC 法

試験法		OECD	EU	EPA	条件の違いが結果に与える影響の考察
試験法 No		117	A08	830.7570	
試験法名称		分配係数 (n-オクタノール/水) : 高速液体クロマトグラフィー (HPLC) 法	分配係数	分配係数 (n-オクタノール/水)、液体クロマトグラフィーによる推算	
適用範囲		logPow 0-6 の物質、特殊な場合~10 まで適用を拡大できる	logPow 0-6 の物質。 強酸、強塩基、金属錯体、界面活性物質、溶離液と反応するものは適さない。	logPow 0-6 の物質。高純度物質。強酸、強塩基、金属錯体、溶離液と反応するもの、界面活性物質は適さない。	
被験物質に関すること		下記の情報を得ておく。 解離定数、構造式、移動相への溶解性、加水分解性。	下記の情報を得ておく。 構造式、解離定数、水溶性、加水分解性、オクタノール溶解性、表面張力。	下記の情報を得ておく。 解離定数、構造式、移動相への溶解性、加水分解性。	
試験条件	基準物質	少なくとも 6 点による校正曲線から保持容量 k を求める。推奨物質が示される。	少なくとも 6 点による校正曲線から保持容量 k を求める。推奨物質 (左に同じ) が示される。	少なくとも 6 点による校正曲線から保持容量 k を求める。推奨物質 (左に同じ) が示される。	
	移動相	最低水 25% を含むメタノール (イソクラティック)。 典型的にはメタノール : 水 = 3 : 1。 流量 1mL/min。 メタノールに不溶の場合、他の移動相も可。 pH2~8。	最低水 25% を含むメタノール (イソクラティック)。 典型的にはメタノール : 水 = 3 : 1。 流量 1mL/min。 メタノールに不溶の場合、他の移動相も可。 pH2~8。	最低水 25% を含むメタノール (イソクラティック)。 典型的にはメタノール : 水 = 3 : 1。 流量 1mL/min。 メタノールに不溶の場合、他の移動相も可。 pH2~8。	
	カラム	C8、C18 等	C8,C18 等	C8,C18 等	
	試験装置・器具	HPLC システム、UV(210nm)または RI 検出器	HPLC システム、UV(210nm)または RI 検出器	適切な検出器のついた HPLC システム。	
	デッドタイムの測定	カラムに保持されない物質 (チオ尿素、ホルムアミド等) を用いる。	カラムに保持されない物質 (チオ尿素、ホルムアミド等) を用いる。	カラムに保持されない物質 (チオ尿素、ホルムアミド等) を用いる。	
	試験温度	測定温度に対し ±1℃ 以内の制御	測定温度に対し ±2K 以内の制御	測定温度に対し ±2K 以内の制御	
	結果の表記	保持時間から基準物質による校正曲線を用いて求める。	保持時間から基準物質による校正曲線を用いて求める。	保持時間から基準物質による校正曲線を用いて求める。	
報告内容		HPLC 条件の詳細と結果。 被験物質、基準物質の詳細、クロマトグラム、デッドタイム、校正曲線とその回帰データ。	HPLC 条件の詳細と結果。 被験物質、基準物質の詳細、クロマトグラム、デッドタイム、校正曲線とその回帰データ。	HPLC 条件の詳細と結果。 被験物質、基準物質の詳細、クロマトグラム、デッドタイム、校正曲線とその回帰データ。	
試験の精度に関すること		N=2 で実施する。 繰り返し精度は logPow の ±0.1 以内。 室間精度はフラスコ法の結果に対し ±0.5 以内であった。	N=2 で実施する。 繰り返し精度は ±0.1 以内。	N=2。 繰り返し精度は ±0.1 以内。 室間精度はフラスコ法の結果に対し ±0.5 以内であった。	