

2. 植物代謝に関する試験成績

(1) ジェトフェンカルブのきゅうりにおける代謝試験

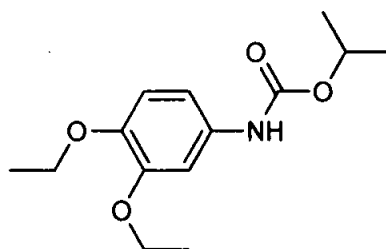
(資料 II-1)

試験機関：住友化学工業株式会社

報告書作成年：1988年

供試標識化合物：[フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

構造式：



*：標識位置

化学名：イソプロピル 3,4-ジエトキシカルバネート

比放射能：

放射化学的純度：

供試植物：きゅうり（品種：相模半白）（温室栽培）

方法：

処理液の調製：フェニル標識体のメタノール溶液を調製し、処理液とした。

処理方法：播種 50 日後のきゅうりの果実の表面にマイクロシリンジを用いて処理液を一様に塗布した。処理量は 250 μg ai/果実¹⁾であった。

採取時期：処理 3、7、10 および 14 日後に果実を採取した。

分析方法：採取した果実の抽出および分析方法のスキームを図 1 に示した。

1) 申請者注：処理量について

ジェトフェンカルブのきゅうりにおける単回施用量は 25 g ai/10 a [ゲッター水和剤およびスミブレンド水和剤 (12.5%)、1500 倍、300L/10 a、6 回、散布]である。本試験で用いた果実処理における処理量 28 g ai/10 a (果実を仮に直径 2.5cm、長さ 10 cm の円柱と見立てて表面積を 88 cm²とした場合) は単回施用量と同等である。

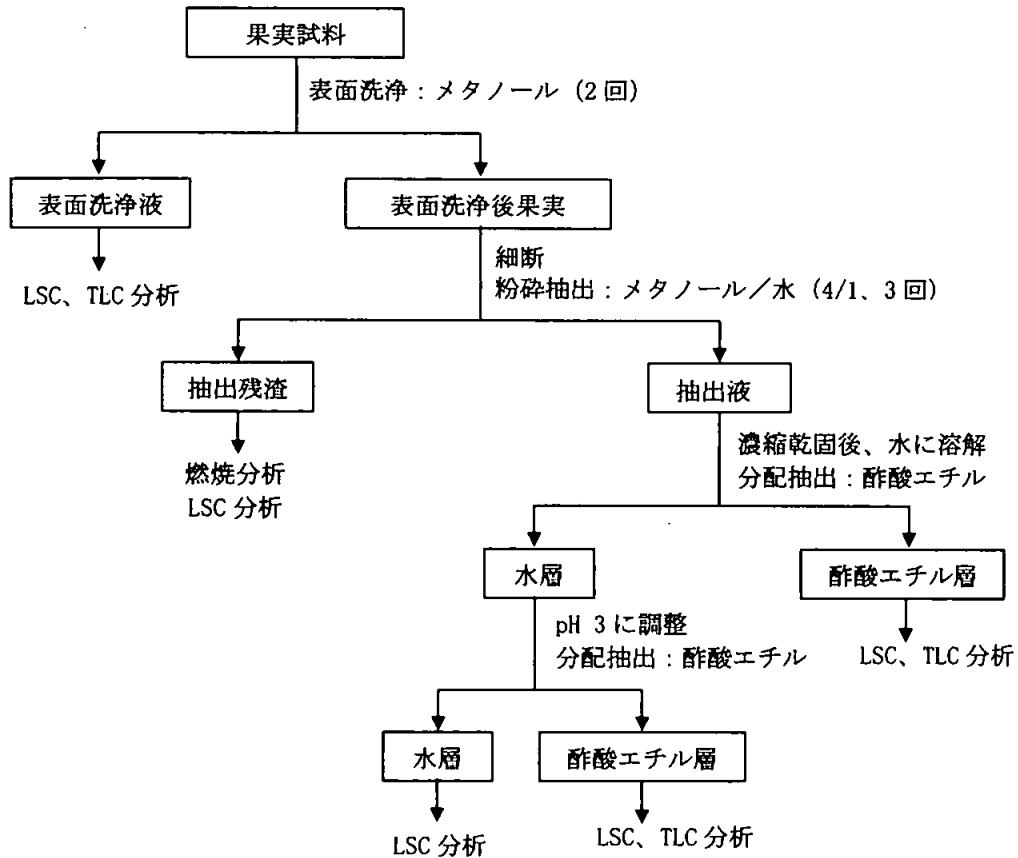


図1 きゅうり果実の抽出および分析スキーム

ジエトフェンカルブおよびその代謝物は、標品との TLC コクロマトグラフィーにより同定・定量した。

ベンゼン/ジエチルエーテル (7/3) の展開溶媒系で TLC の原点に留まった抱合体代謝物は、単離後、セルラーゼ (pH 4.5、37°C、12 時間) で加水分解し、遊離したアグリコンを酢酸エチルで抽出して標品と TLC コクロマトグラフィーを行うことにより抱合体の同定を行った。

結果：

¹⁴C 分布：きゅうり果実の各抽出画分における放射能分布および代謝物分布を表 1 に示した。

表面洗浄液、抽出液および抽出残渣中の放射能は、2 連の平均でそれぞれ処理量に対して、68.7~75.2% (69.8~81.8%TRR、TRR：総残留放射能)、14.3~24.2%

(15.6~24.4%TRR) および 2.5~5.7% (2.7~5.8%TRR) であった。

代謝： きゅうり果実における主要残留物は未変化のジエトフェンカルブであり、処理量に対して 70.9~78.1% (76.0~85.0%TRR) 残存した。代謝物として、3-OH-DFC およびその抱合体、4-OH-DFC の抱合体、DFC-COOH の抱合体、DFC-CH₂OH およびその抱合体、および DPO が検出されたが、いずれの代謝物も処理量の 2.1% (2.1%TRR) 以下であった。これらの抱合体はセルラーゼによって加水分解されるため、グルコシド抱合体であると考えられた。DPO は極性代謝物の酵素処理 (pH 4.5) 中に、またシリカリゲル薄層板上のような酸性条件下で、分子内環化反応により DFC-COOH から生成すると考えられた。他にセルラーゼで加水分解されない抱合体代謝物 (表 1 中に「原点」として記載) が処理量に対して 1.9~5.8% (2.1~5.8%TRR) 存在した。

推定代謝経路：ジエトフェンカルブのきゅうりにおける推定代謝経路を図 2 に示した。ジエトフェンカルブはきゅうり果実において、イソプロピルメチル基の水酸化とそれに続くカルボン酸への酸化、およびフェニル環の 3 あるいは 4 位の脱エチル化を経て代謝され、生成した代謝物はさらに糖との抱合反応を受けると考えられた。

表1 フェニル標識体を処理したきゅうり果実における代謝物分布

	処理 ^{14}C に対する割合 (%) (括弧内の数値は%TRR)							
	処理後日数							
	3		7		10		14	
表面洗浄	74.5	(74.6)	68.7	(73.7)	69.0	(69.8)	75.2	(81.8)
ジエトフェンカルブ	74.0	(74.1)	68.4	(73.3)	68.6	(69.4)	74.8	(81.4)
DFC-COOH (抱合体)	<0.1	(<0.1)	<0.1	(<0.1)	ND		<0.1	(<0.1)
3-OH-DFC	0.1	(0.1)	ND		<0.1	(<0.1)	<0.1	(<0.1)
DPO ^a	<0.1	(<0.1)	0.1	(0.1)	0.1	(0.1)	<0.1	(<0.1)
TLC 原点	0.1	(0.1)	0.1	(0.1)	0.2	(0.2)	0.1	(0.1)
その他	0.3	(0.3)	0.2	(0.2)	0.2	(0.2)	0.3	(0.3)
抽出液	21.1	(21.1)	20.4	(21.9)	24.2	(24.4)	14.3	(15.6)
ジエトフェンカルブ	3.8	(3.8)	2.5	(2.7)	7.3	(7.4)	3.3	(3.6)
DFC-COOH (抱合体)	0.5	(0.5)	1.4	(1.5)	1.4	(1.4)	1.1	(1.1)
4-OH-DFC (抱合体)	0.8	(0.8)	0.8	(0.9)	0.5	(0.5)	0.6	(0.7)
3-OH-DFC (抱合体)	1.0	(1.0)	1.9	(2.0)	2.1	(2.1)	1.4	(1.5)
DPO ^a	0.2	(0.2)	0.1	(0.1)	0.1	(0.1)	ND	
DFC-CH ₂ OH	0.1	(0.1)	0.2	(0.2)	0.2	(0.2)	<0.1	(<0.1)
DFC-CH ₂ OH (抱合体)	1.0	(1.0)	1.0	(1.1)	1.0	(1.0)	0.7	(0.8)
原点	5.8	(5.8)	4.5	(4.8)	3.8	(3.8)	1.9	(2.1)
その他	8.0	(8.0)	8.2	(8.8)	7.9	(8.0)	5.4	(5.9)
抽出残渣	4.3	(4.3)	4.2	(4.5)	5.7	(5.8)	2.5	(2.7)
合計	99.8	(100.0)	93.3	(100.0)	98.8	(100.0)	91.9	(100.0)

数値は2連の平均値 (申請者が計算)

括弧内の数値 (%TRR) は、処理量に対する割合をもとに申請者が計算した。

ND: 検出せず。

a: DPO は、分析操作中における DFC-COOH の分子内環化反応により生成したと考えられた。

図2 ジェトフェンカルブのきゅうりにおける推定代謝経路

(2) ジェトフェンカルブのきゅうりおよびぶどうにおける代謝試験

(資料 II-2)

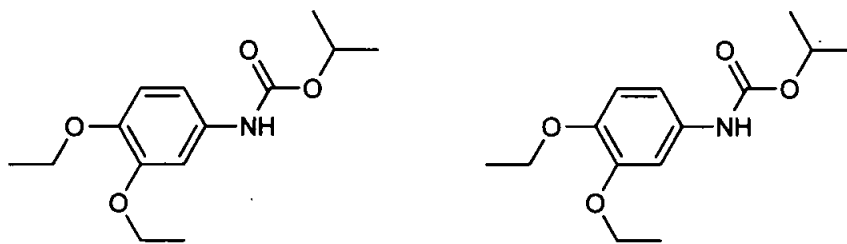
試験機関：住友化学工業株式会社

報告書作成年：1986年

供試標識化合物：[フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

[イソプロピル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

構造式：



*：標識位置

化学名：イソプロピル 3,4-ジェトフェンカルブネート

	フェニル標識体	イソプロピル標識体
標識位置		
比放射能		
放射化学的純度		

供試植物：きゅうり（品種：霜不知地道）

ぶどう（品種：ネオマスカット）

両植物とも、処理前は屋外で栽培し、処理後は温室で栽培した。

方法：

処理液の調製：各標識体のメタノール/水（1/1）溶液を調製し、処理液とした。

処理方法：

きゅうり；果実形成期の葉の表面にマイクロピペットを用いて、処理液を苗1本あたり葉2枚に1250 μg ai/葉の割合で塗布した。

ぶどう；7~8葉期の葉の表面にマイクロシリンジを用いて、処理液を苗1本あたり葉2枚に125 μg ai/葉の割合で塗布した。

採取時期：以下の時点で植物の地上部分を切断し、処理葉、処理葉以外の地上部および果実に分け、分析試料とした。

きゅうり；処理 3、7、14、21 および 30 日後

ぶどう； 処理 3、7、14、21、30、45、60 および 90 日後

分析方法：採取した処理葉の抽出および分析方法のスキームを図 1 に示した。

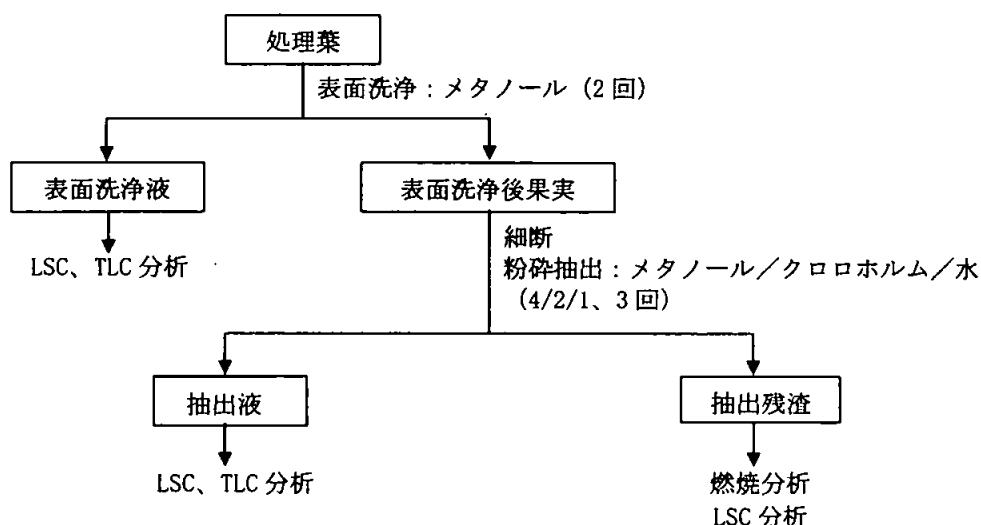


図 1 きゅうりおよびぶどう処理葉の抽出および分析スキーム

処理葉以外の地上部および果実は、表面洗浄以外は処理葉と同様に抽出した。ジェットフェンカルブおよびその代謝物は、標品との TLC コクロマトグラフィーにより同定・定量した。

ベンゼン/ジエチルエーテル (7/3) の展開溶媒系で TLC の原点に留まる抱合体代謝物は、単離後、セルラーゼ (pH 4.5、12 時間) で加水分解し、遊離したアグリコンを酢酸エチルで抽出して標品と TLC コクロマトグラフィーを行うことにより抱合体の同定を行った。

結果：

吸収・移行：きゅうりおよびぶどうにおける放射能分布をそれぞれ表 1~2 および表 3~4 に示した。

きゅうりにおいては処理した ^{14}C は処理葉表面から速やかに減少するとともに、処理葉内部に浸透した ^{14}C は経時的に増加した。一方、ぶどうから回収された ^{14}C のほとんどは処理葉表面に存在した。

処理30日後のきゅうり処理葉における¹⁴C量は、表面洗浄液、抽出液および抽出残渣中でそれぞれ処理量に対して12.4~13.6、26.0~28.9および6.8~10.3% (22.2~27.4、51.8~52.4および13.7~18.5%TRR) (%TRRは残留放射能に対する割合を示す)であった。処理30日後のきゅうりにおいて、処理葉以外の地上部から処理量に対して2.2~2.7%、果実に0.5~2.0%の¹⁴Cが検出された。

処理90日後のぶどう処理葉における¹⁴C量は、表面洗浄液、抽出液および抽出残渣中でそれぞれ処理量に対して21.1~28.0、5.7~6.0および2.0~3.6% (67.6~76.5、15.6~19.2および5.5~11.5%TRR)であった。処理葉から他の植物部位へ移行した¹⁴Cは少量であり、処理90日後のぶどうにおいて、処理葉以外の地上部から検出された¹⁴Cは処理量に対して0.5~0.9%であった。

代謝： 処理葉における主要残留物は未変化のジエトフェンカルブであり、処理葉から経時的に減少し、きゅうり（処理30日後）およびぶどう（処理90日後）において、それぞれ処理量に対して9.9~13.0% (17.8~26.2%TRR)、および19.2~26.0% (61.6~71.0%TRR) 残存しており、ジエトフェンカルブの消失半減期は、きゅうりおよびぶどうでそれぞれ、約9日および約34日であった。

きゅうり処理葉における主要代謝物は、DFC-COOH 抱合体および3-OH-DFC 抱合体であり、処理30日後に最高値を示し、それぞれ処理量の7.6~9.1% (15.3~16.3%TRR) および処理量の6.4~7.7% (11.4~15.5%TRR) 生成した。その他の代謝物としては、3-OH-DFC、4-OH-DFC 抱合体およびDPOが検出されたが、いずれも処理量の2.2% (4.0%TRR) 以下であった。

ぶどう処理葉における代謝物は、DFC-COOH 抱合体、3-OH-DFC 抱合体、およびDPOであったが、いずれも処理量の1.7% (4.2%TRR) 以下であった。

これらの抱合体はセルラーゼによって加水分解されるため、グルコシド抱合体であると考えられた。DPOは酸性条件下でDFC-COOHの分子内環化反応により生成すると考えられた。他にセルラーゼで加水分解されない抱合体代謝物（表1~4中に「原点」として記載）が存在したが、別途行った*in vitro* 実験の結果から、システインあるいはグルタチオン抱合体であることが示唆された。

きゅうりにおいて、ジエトフェンカルブは処理部以外の地上部および果実に少量存在したが、移行した放射能の主要成分は抱合体代謝物と考えられた。

推定代謝経路：ジエトフェンカルブのきゅうりおよびぶどうにおける推定代謝経路を図2に示した。

ジエトフェンカルブはきゅうりおよびぶどうにおいて、イソプロピルメチル基の水酸化とそれに続くカルボン酸への酸化、およびフェニル環の3あるいは4位の脱エチル化を経て代謝され、生成した代謝物はさらに糖との抱合反応を受けると考えられた。

表1 きゅうりにおける放射能分布 (フェニル標識体)

	処理 ¹⁴ C に対する割合 (%) (括弧内の数値は%TRR)				
	処理後日数				
	3	7	14	21	30
処理葉	78.0 (99.0)	77.9 (99.1)	65.3 (97.3)	58.7 (97.7)	51.6 (92.5)
表面洗浄	62.6 (79.4)	52.9 (67.3)	42.1 (62.7)	27.6 (45.9)	12.4 (22.2)
ジエトフェンカルブ ^a	56.6 (71.8)	49.7 (63.2)	37.6 (56.0)	22.8 (37.9)	7.9 (14.2)
DFC-COOH(抱合体)	0.6 (0.8)	0.6 (0.8)	1.0 (1.5)	1.2 (2.0)	1.3 (2.3)
4-OH-DFC(抱合体)	ND	ND	ND	ND	0.1 (0.2)
3-OH-DFC	0.2 (0.3)	0.1 (0.1)	0.2 (0.3)	0.1 (0.2)	<0.1 (<0.2)
3-OH-DFC(抱合体)	0.3 (0.4)	0.5 (0.6)	0.8 (1.2)	0.7 (1.2)	0.8 (1.4)
DPO ^a	1.2 (1.5)	0.3 (0.4)	0.2 (0.3)	0.2 (0.3)	0.1 (0.2)
原点	2.3 (2.9)	1.0 (1.3)	1.5 (2.2)	1.6 (2.7)	1.7 (3.0)
その他	1.4 (1.8)	0.7 (0.9)	0.8 (1.2)	1.0 (1.7)	0.5 (0.9)
抽出液	12.9 (16.4)	21.9 (27.9)	19.4 (28.9)	25.1 (41.8)	28.9 (51.8)
ジエトフェンカルブ ^a	4.5 (5.7)	11.3 (14.4)	5.6 (8.3)	5.7 (9.5)	2.0 (3.6)
DFC-COOH(抱合体)	2.3 (2.9)	2.6 (3.3)	3.7 (5.5)	5.9 (9.8)	7.8 (14.0)
4-OH-DFC(抱合体)	ND	ND	ND	ND	2.1 (3.8)
3-OH-DFC	0.1 (0.1)	0.1 (0.1)	0.1 (0.1)	0.1 (0.2)	0.1 (0.2)
3-OH-DFC(抱合体)	2.1 (2.7)	2.6 (3.3)	3.4 (5.1)	4.3 (7.2)	5.6 (10.0)
DPO ^a	0.2 (0.3)	0.1 (0.1)	0.1 (0.1)	0.2 (0.3)	0.1 (0.2)
原点	2.4 (3.0)	3.6 (4.6)	4.5 (6.7)	6.2 (10.3)	8.5 (15.2)
その他	1.3 (1.6)	1.6 (2.0)	2.0 (3.0)	2.7 (4.5)	2.7 (4.8)
抽出残渣	2.5 (3.2)	3.1 (3.9)	3.8 (5.7)	6.0 (10.0)	10.3 (18.5)
処理葉以外の地上部	0.7 (0.9)	0.5 (0.6)	1.7 (2.5)	1.0 (1.7)	2.2 (3.9)
抽出液	0.2 (0.3)	0.3 (0.4)	1.2 (1.8)	0.8 (1.3)	1.6 (2.9)
ジエトフェンカルブ ^a	0.1 (0.1)	0.1 (0.1)	0.2 (0.3)	0.2 (0.3)	0.1 (0.2)
その他	0.1 (0.1)	0.2 (0.3)	1.0 (1.5)	0.6 (1.0)	1.5 (2.7)
抽出残渣	0.5 (0.6)	0.2 (0.3)	0.5 (0.7)	0.2 (0.3)	0.6 (1.1)
果実	0.1 (0.1)	0.2 (0.3)	0.1 (0.1)	0.4 (0.7)	2.0 (3.6)
抽出液	0.1 (0.1)	0.2 (0.3)	<0.1 (<0.1)	0.4 (0.7)	1.6 (2.9)
ジエトフェンカルブ ^a	<0.1 (<0.1)	<0.1 (<0.1)	<0.1 (<0.1)	ND	ND
その他	<0.1 (<0.1)	0.2 (0.3)	<0.1 (<0.1)	0.4 (0.7)	1.6 (2.9)
抽出残渣	<0.1 (<0.1)	<0.1 (<0.1)	0.1 (0.1)	<0.1 (<0.2)	0.4 (0.7)
合計	78.8(100.0)	78.6(100.0)	67.1 (100.0)	60.1(100.0)	55.8(100.0)

ND: 検出せず

a: DPOは、分析操作中におけるDFC-COOHの分子内環化反応により生成したと考えられた。
括弧内の数値(%TRR: 残留放射能に対する割合)は、処理量に対する割合をもとに申請者が計算した。

表2 きゅうりににおける放射能分布 (インプロピル標識体)

	処理 ^{14}C に対する割合 (%) (括弧内の数値は%TRR)									
	処理後日数									
	3	7	14	21	30	3	7	14	21	30
処理葉	75.0 (98.8)	69.3 (98.4)	54.7 (98.0)	59.9 (97.7)	46.4 (93.5)					
表面洗浄	53.9 (71.0)	44.6 (63.4)	32.7 (58.6)	32.8 (53.5)	13.6 (27.4)					
ジエトフェンカルブ ^a	47.4 (62.5)	39.5 (56.1)	28.2 (50.5)	27.1 (44.2)	10.2 (20.6)					
DFC-COOH(抱合体)	0.5 (0.7)	0.7 (1.0)	0.7 (1.3)	1.3 (2.1)	0.8 (1.6)					
4-OH-DFC(抱合体)	ND	ND	ND	ND	0.1 (0.2)					
3-OH-DFC	0.2 (0.3)	0.2 (0.3)	0.3 (0.5)	0.1 (0.2)	<0.1 (<0.2)					
3-OH-DFC(抱合体)	0.5 (0.7)	0.7 (1.0)	0.7 (1.3)	1.1 (1.8)	0.7 (1.4)					
DPO ^a	1.1 (1.4)	0.8 (1.1)	0.5 (0.9)	0.2 (0.3)	0.1 (0.2)					
原点	2.1 (2.8)	1.5 (2.1)	1.1 (2.0)	1.7 (2.8)	1.2 (2.4)					
その他	2.1 (2.8)	1.2 (1.7)	1.2 (2.2)	1.3 (2.1)	0.5 (1.0)					
抽出液	18.9 (24.9)	20.6 (29.3)	17.7 (31.7)	20.8 (33.9)	26.0 (52.4)					
ジエトフェンカルブ ^a	6.6 (8.7)	8.3 (11.8)	4.5 (8.1)	5.1 (8.3)	2.8 (5.6)					
DFC-COOH(抱合体)	2.8 (3.7)	3.0 (4.3)	3.6 (6.5)	4.6 (7.5)	6.8 (13.7)					
4-OH-DFC(抱合体)	ND	ND	ND	ND	0.7 (1.4)					
3-OH-DFC	0.1 (0.1)	0.1 (0.1)	0.1 (0.2)	0.1 (0.2)	0.1 (0.2)					
3-OH-DFC(抱合体)	3.4 (4.5)	2.9 (4.1)	3.9 (7.0)	3.7 (6.0)	7.0 (14.1)					
DPO ^a	0.1 (0.1)	0.1 (0.1)	0.2 (0.4)	0.2 (0.3)	0.1 (0.2)					
原点	3.6 (4.7)	4.5 (6.4)	3.5 (6.3)	5.4 (8.8)	6.2 (12.5)					
その他	2.3 (3.0)	1.7 (2.4)	1.9 (3.4)	1.7 (2.8)	2.3 (4.6)					
抽出残渣	2.2 (2.9)	4.1 (5.8)	4.3 (7.7)	6.3 (10.3)	6.8 (13.7)					
処理葉以外の地上部	0.8 (1.1)	1.0 (1.4)	1.1 (2.0)	1.2 (2.0)	2.7 (5.4)					
抽出液	0.6 (0.8)	0.7 (1.0)	0.8 (1.4)	0.9 (1.5)	2.0 (4.0)					
ジエトフェンカルブ ^a	0.2 (0.3)	0.1 (0.1)	0.2 (0.4)	0.1 (0.2)	0.3 (0.6)					
その他	0.4 (0.5)	0.6 (0.9)	0.6 (1.1)	0.8 (1.3)	1.7 (3.4)					
抽出残渣	0.2 (0.3)	0.3 (0.4)	0.3 (0.5)	0.3 (0.5)	0.7 (1.4)					
果実	0.1 (0.1)	0.1 (0.1)	<0.1 (<0.2)	0.2 (0.3)	0.5 (1.0)					
抽出液	0.1 (0.1)	0.1 (0.1)	<0.1 (<0.2)	0.2 (0.3)	0.5 (1.0)					
ジエトフェンカルブ ^a	<0.1 (<0.1)	<0.1 (<0.1)	<0.1 (<0.2)	ND	ND					
その他	0.1 (0.1)	0.1 (0.1)	<0.1 (<0.2)	0.2 (0.3)	0.5 (1.0)					
抽出残渣	<0.1 (<0.1)	<0.1 (<0.1)	<0.1 (<0.2)	<0.1 (<0.2)	<0.1 (<0.2)					
合計	75.9(100.0)	70.4(100.0)	55.8(100.0)	61.3(100.0)	49.6(100.0)					

ND: 検出せず

a: DPOは、分析操作中におけるDFC-COOHの分子内環化反応により生成したと考えられた。
括弧内の数値(%TRR: 残留放射能に対する割合)は、処理量に対する割合をもとに申請者が計算した。

表3 ぶどうにおける放射能分布（フェニル標識体）

	処理 ¹⁴ Cに対する割合（%）（括弧内の数値は%TRR）									
	処理後日数									
	3	7	14	21	30	45	60	90		
処理葉	91.7 (99.8)	86.3 (99.9)	73.2 (97.9)	69.8 (99.3)	61.5 (95.3)	41.6 (96.3)	36.7 (96.6)	30.7 (98.4)		
表面洗浄	90.2 (98.2)	82.2 (95.1)	64.7 (86.5)	64.5 (91.7)	56.0 (86.8)	30.7 (71.1)	25.9 (68.2)	21.1 (67.6)		
ジエトフェンカルブ	88.7 (96.5)	80.4 (93.1)	63.4 (84.8)	63.0 (89.6)	54.9 (85.1)	28.1 (65.0)	23.4 (61.6)	18.9 (60.6)		
DPO ^a	0.4 (0.4)	0.3 (0.3)	0.2 (0.3)	0.3 (0.4)	0.2 (0.3)	0.5 (1.2)	0.6 (1.6)	0.4 (1.3)		
原点	0.4 (0.4)	0.2 (0.2)	0.6 (0.8)	0.7 (1.0)	0.5 (0.8)	1.1 (2.5)	1.1 (2.9)	1.0 (3.2)		
その他	0.7 (0.8)	1.3 (1.5)	0.5 (0.7)	0.5 (0.7)	0.4 (0.6)	1.0 (2.3)	0.8 (2.1)	0.8 (2.6)		
抽出液	1.3 (1.4)	3.2 (3.7)	6.6 (8.8)	4.0 (5.7)	4.2 (6.5)	7.3 (16.9)	7.6 (20.0)	6.0 (19.2)		
ジエトフェンカルブ	0.5 (0.5)	0.6 (0.7)	1.3 (1.7)	0.8 (1.1)	0.7 (1.1)	0.3 (0.7)	0.1 (0.3)	0.3 (1.0)		
DFC-COOH(抱合体)	0.1 (0.1)	0.5 (0.6)	1.2 (1.6)	0.7 (1.0)	0.8 (1.2)	1.7 (3.9)	1.6 (4.2)	1.1 (3.5)		
3-OH-DFC(抱合体)	<0.1 (<0.1)	0.1 (0.1)	0.4 (0.5)	0.2 (0.3)	0.2 (0.3)	0.4 (0.9)	0.4 (1.1)	0.3 (1.0)		
原点	0.3 (0.3)	1.3 (1.5)	2.6 (3.5)	1.6 (2.3)	1.8 (2.8)	3.4 (7.9)	3.8 (10.0)	2.6 (8.3)		
その他	0.4 (0.4)	0.7 (0.8)	1.1 (1.5)	0.7 (1.0)	0.7 (1.1)	1.5 (3.5)	1.7 (4.5)	1.7 (5.4)		
抽出残渣	0.2 (0.2)	0.9 (1.0)	1.9 (2.5)	1.3 (1.8)	1.3 (2.0)	3.6 (8.3)	3.2 (8.4)	3.6 (11.5)		
処理葉以外の地上部	0.2 (0.2)	0.1 (0.1)	1.6 (2.1)	0.5 (0.7)	3.0 (4.7)	1.6 (3.7)	1.3 (3.4)	0.5 (1.6)		
抽出液	0.2 (0.2)	<0.1 (<0.1)	1.4 (1.9)	0.3 (0.4)	2.7 (4.2)	1.0 (2.3)	0.7 (1.8)	0.2 (0.6)		
抽出残渣	<0.1 (<0.1)	0.1 (0.1)	0.2 (0.3)	0.2 (0.3)	0.3 (0.5)	0.6 (1.4)	0.6 (1.6)	0.3 (1.0)		
合計	91.9 (100.0)	86.4 (100.0)	74.8 (100.0)	70.3 (100.0)	64.5 (100.0)	43.2 (100.0)	38.0 (100.0)	31.2 (100.0)		

a: DPOは、分析操作中におけるDFC-COOHの分子内環化反応により生成したと考えられた。

括弧内の数値(%TRR:残留放射能に対する割合)は、処理量に対する割合をもとに申請者が計算した。

表4 ぶどうにおける放射能分布 (イソプロピル標識体)

	処理 ¹⁴ Cに対する割合 (%) (括弧内の数値は%TRR)									
	処理後日数									
	3	7	14	21	30	45	60	90		
処理葉	96.5 (99.8)	88.2 (99.7)	79.3 (97.5)	64.6 (98.9)	64.5 (96.0)	45.5 (96.2)	40.6 (97.6)	35.7 (97.5)		
表面洗浄	94.5 (97.7)	82.9 (93.7)	74.3 (91.4)	60.1 (92.0)	58.6 (87.2)	35.7 (75.5)	34.3 (82.5)	28.0 (76.5)		
ジエトキシカルブ	93.1 (96.3)	81.7 (92.3)	72.9 (89.7)	59.2 (90.7)	57.6 (85.7)	30.8 (65.1)	31.6 (76.0)	25.8 (70.5)		
DP0 ^a	0.4 (0.4)	0.4 (0.5)	0.4 (0.5)	0.2 (0.3)	0.2 (0.3)	1.6 (3.4)	0.9 (2.2)	0.6 (1.6)		
原点	0.3 (0.3)	0.2 (0.2)	0.4 (0.5)	0.3 (0.5)	0.4 (0.6)	1.2 (2.5)	0.7 (1.7)	0.8 (2.2)		
その他	0.7 (0.7)	0.6 (0.7)	0.6 (0.7)	0.4 (0.6)	0.4 (0.6)	2.1 (4.4)	1.1 (2.6)	0.8 (2.2)		
抽出液	1.6 (1.7)	4.1 (4.6)	4.1 (5.0)	3.5 (5.4)	4.8 (7.1)	7.3 (15.4)	4.3 (10.3)	5.7 (15.6)		
ジエトキシカルブ	0.5 (0.5)	0.9 (1.0)	0.7 (0.9)	0.6 (0.9)	1.7 (2.5)	0.4 (0.8)	0.7 (1.7)	0.2 (0.5)		
DFC-COOH(抱合体)	0.1 (0.1)	0.5 (0.6)	0.8 (1.0)	0.6 (0.9)	0.7 (1.0)	1.4 (3.0)	0.6 (1.4)	1.2 (3.3)		
3-OH-DFC(抱合体)	<0.1 (<0.1)	0.1 (0.1)	0.3 (0.4)	0.2 (0.3)	0.1 (0.1)	0.4 (0.8)	0.2 (0.5)	0.4 (1.1)		
原点	0.6 (0.6)	1.9 (2.1)	1.7 (2.1)	1.5 (2.3)	1.5 (2.2)	3.3 (7.0)	1.7 (4.1)	2.5 (6.8)		
その他	0.4 (0.4)	0.7 (0.8)	0.6 (0.7)	0.6 (0.9)	0.8 (1.2)	1.8 (3.8)	1.1 (2.6)	1.4 (3.8)		
抽出残渣	0.4 (0.4)	1.2 (1.4)	0.9 (1.1)	1.0 (1.5)	1.1 (1.6)	2.5 (5.3)	2.0 (4.8)	2.0 (5.5)		
処理葉以外の地上部	0.2 (0.2)	0.3 (0.3)	2.0 (2.5)	0.7 (1.1)	2.7 (4.0)	1.8 (3.8)	1.0 (2.4)	0.9 (2.5)		
抽出液	0.2 (0.2)	0.2 (0.2)	1.8 (2.2)	0.5 (0.8)	2.6 (3.9)	1.4 (3.0)	0.6 (1.4)	0.6 (1.6)		
抽出残渣	<0.1 (<0.1)	0.1 (0.1)	0.2 (0.2)	0.2 (0.3)	0.1 (0.1)	0.4 (0.8)	0.4 (1.0)	0.3 (0.8)		
合計	96.7 (100.0)	88.5 (100.0)	81.3 (100.0)	65.3 (100.0)	67.2 (100.0)	47.3 (100.0)	41.6 (100.0)	36.6 (100.0)		

a: DP0は、分析操作中におけるDFC-COOHの分子内環化反応により生成したと考えられた。
括弧内の数値(%TRR: 残留放射能に対する割合)は、処理量に対する割合をもとに申請者が計算した。

図2 ジェトフェンカルブのきゅうりおよびぶどうにおける推定代謝経路

(3) ジェトフェンカルブのぶどうにおける代謝試験

(資料 II-3)

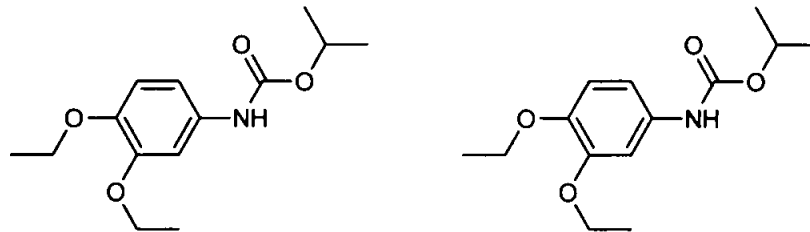
試験機関：PTRL West, Inc.

[GLP 対応]

報告書作成年：2002 年

供試標識化合物：[フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ
[イソプロピル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

構造式：



*：標識位置

化学名：イソプロピル N-(3,4-ジエトキシフェニル) カルバマート

	フェニル標識体	イソプロピル標識体
標識位置		
比放射能		
放射化学的純度		

供試植物：ぶどう（品種：Perlette）（屋外栽培）

方法：

処理液の調製：同位体希釈した各標識体と空製剤（WP）をアセトニトリル/メタノール中で混合した。溶媒を除去した後、水を加え粉碎することにより、処理製剤を調製した。

処理方法：調製した処理製剤を 500 g ai/ha (100~400 L/ha) の割合で、収穫 35 日前のぶどうの房およびその周辺の葉に約 12 インチの距離から散布した。実際の処理量は、525 g ai/ha (フェニル標識体) および 609 g ai/ha (イソプロピル標識体) であった。¹⁾

1) 申請者注：処理量について

ジェトフェンカルブのぶどうにおける散布処理の単回施用量は 88 g ai/10 a [ゲッター水和剤 (12.5%) 水和剤、1000~1500 倍希釈、200~700L/10 a、3 回] である。本試験で採用した処理量は 53~61 g ai/10 a であり、単回施用量の 0.6~0.7 倍である。

採取時期：処理 35 日後にぶどう果実（房）を採取した。

分析方法：果実試料の分析方法のスキームを図 1 に示した。

ジエトフェンカルブおよびその代謝物は、表面洗浄液および各抽出液について、それぞれ標品との HPLC および TLC コクロマトグラフィーを行い同定・定量した。

抽出残渣の一部については、段階的な酵素処理（デキストラナーゼ、セルラーゼ、ペクチナーゼおよびプロテアーゼ）、および化学処理（1%ドデシル硫酸ナトリウム（SDS）抽出、6 M 塩酸還流抽出および 6 M 水酸化ナトリウム還流抽出）を行った。各抽出液中の放射能は LSC により測定し、最終的な残渣中の放射能について燃焼分析により測定した。

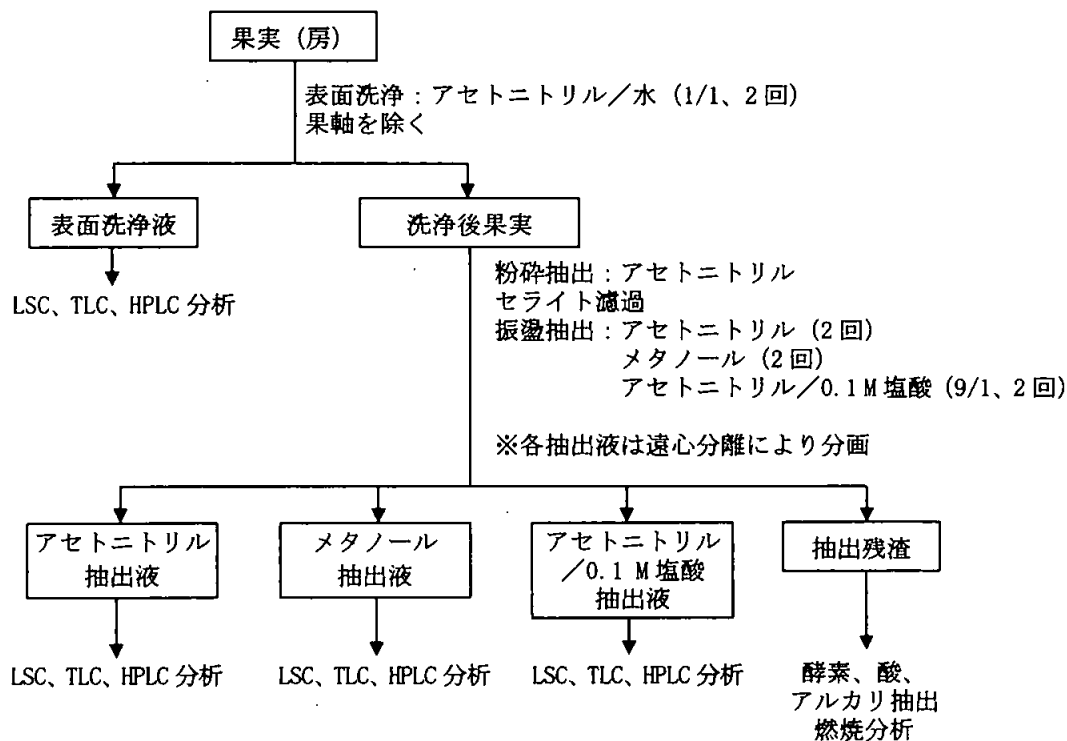


図 1 果実の抽出および分析スキーム

試験結果：

^{14}C 分布：ぶどう果実の抽出画分における ^{14}C 分布を表 1 に示した。

ぶどう果実の総残留放射能（TRR）濃度は、2.831～5.465 ppm であった。表面洗浄液、抽出液および抽出残渣中の放射能はそれぞれ、20.46～23.34、60.14～63.45 および 13.21～19.39%TRR であった。

抽出残渣について段階的な酵素処理（デキストラナーゼ、セルラーゼ、ペクチナーゼおよびプロテアーゼ）、および化学処理（1%SDS、6 M 塩酸および6 M 水酸化ナトリウム）を実施し、その結果を表2に示した。

フェニル標識体からは、各酵素処理によって1%TRRを超える放射能は抽出されなかったが、化学処理（1%SDS、6 M 塩酸および6 M 水酸化ナトリウム）によって、それぞれ1.1、3.2および2.4%TRRの放射能が抽出され、最終的な抽出残渣中の放射能は14.1%TRRとなった。

表1 ぶどう果実の抽出画分における¹⁴C分布

画分	フェニル標識体		イソプロピル標識体	
	%TRR ^a	ppm ^b	%TRR	ppm
表面洗浄液	20.46	0.579	23.33	1.275
抽出液	60.14	1.703	63.45	3.468
アセトニトリル	58.77	1.664	62.36	3.408
メタノール	1.02	0.029	0.84	0.046
アセトニトリル/塩酸	0.35	0.010	0.25	0.014
抽出残渣	19.39	0.549	13.21	0.722
合計	100	2.831	100	5.465

a: ぶどう果実中の総残留放射能 (TRR) に対する割合 (%)

b: ジェトフェンカルブ換算値

表2 ぶどう果実抽出残渣の段階的抽出の結果

抽出画分	フェニル標識体		イソプロピル標識体 ^c	
	%TRR ^a	ppm ^b	%TRR	ppm
デキストラナーゼ抽出物	0.68	0.019	0.26	0.014
セルラーゼ抽出物	0.21	0.006	0.09	0.005
ペクチナーゼ抽出物	0.08	0.002	0.04	0.002
プロテアーゼ抽出物	0.22	0.006	0.13	0.007
SDS 抽出物	1.10	0.031	0.68	0.037
6 M 塩酸抽出物	3.15	0.089	0.09	0.005
6 M 水酸化ナトリウム抽出物	2.43	0.069	0.82	0.045
最終抽出残渣	14.06	0.398	0.48	0.026

a: ぶどう果実中の総残留放射能 (TRR) に対する割合 (%)

b: ジェトフェンカルブ換算値

c: イソプロピル標識体の抽出残渣の段階的抽出において¹⁴C回収率が低下したのは6M塩酸および水酸化ナトリウムを用いた加熱還流の際に、揮発性¹⁴C成分が揮散したためと考えられる。

代謝： ぶどう果実における代謝物分析の結果を表 3 に示した。

主要代謝物は、4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC および 4-Glc-DFC であり、それぞれ 20.70~21.48 および 14.60~15.47%TRR 検出された。その他に、4-OH-DFC、4-OH-5-TLA-DFC および 4-Glc-5-TLA-DFC が同定されたが、いずれの代謝物も 3.21%TRR 以下であった。

同定された代謝物以外に 23 個の未同定成分が検出されたが、個々の成分はいずれも 10%TRR 未満であった。そのうちの最大成分は、フェニル標識体では 5.76%TRR、イソプロピル標識体では 8.20%TRR であったが、別の溶媒系を用いた HPLC 分析によりさらにいくつかの成分からなることが示された。

表 3 ぶどう果実中における代謝物分布^a

化合物	フェニル標識体		イソプロピル標識体	
	%TRR ^b	ppm ^c	%TRR	ppm
DFC	19.92	0.564	23.15	1.265
4-OH-DFC	0.39	0.011	0.86	0.047
4-OH-5-TLA-DFC	3.21	0.091	2.01	0.110
DFC-COOH	trace ^d	trace	trace	trace
4-Glc-DFC	15.47	0.438	14.60	0.798
4-Glc-5-TLA-DFC	1.59	0.045	1.90	0.104
4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC	21.48	0.608	20.66	1.129

a: 表面洗浄液および各抽出液 (アセトニトリル、メタノールおよびアセトニトリル/0.1 M 塩酸) の HPLC 分析結果から求めた。

b: ぶどう果実中の総放射能残留 (TRR) に対する割合 (%)

c: ジェトフェンカルブ換算値

d: trace は痕跡量検出されたことを示す。

推定代謝経路: ジェトフェンカルブのぶどうにおける推定代謝経路を図 2 に示した。

ジェトフェンカルブはフェニル環 4 位のエトキシ基の脱エチル化を経て、グルコース抱合化、もしくはフェニル環 5 位のグルタチオン由来によるメルカプト乳酸抱合化により代謝された。後者はさらに、フェニル環 4 位もしくはメルカプト乳酸の水酸基がグルコース抱合されると考えられた。また、マイナーな経路としてイソプロピルメチル基が酸化されてカルボン酸を生成する経路も存在した。

図2 ジェトフェンカルブのぶどうにおける推定代謝経路

(4) ジェトフェンカルブのトマトにおける代謝試験

(資料 II-4)

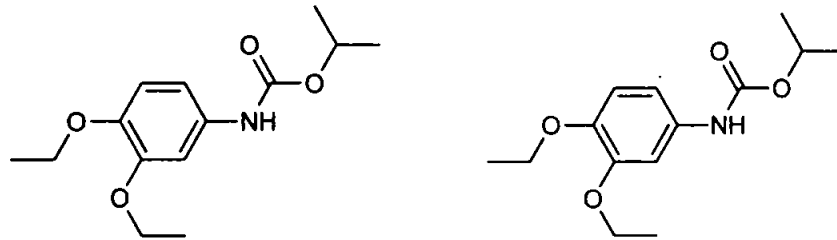
試験機関：PTRL West, Inc.

[GLP 対応]

報告書作成年：2003 年

供試標識化合物：[フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ
[イソプロピル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

構造式：



*：標識位置

化学名：イソプロピル 3,4-ジエトキシカルバネート

	フェニル標識体	イソプロピル標識体
標識位置		
比放射能		
放射化学的純度		

供試植物：トマト（品種：Rio Grand）（屋外栽培）

方法：

処理液の調製：同位体希釈した各標識体と空製剤（WP）をアセトニトリル中で混合した。
溶媒を除去した後、水を加え粉碎することにより、処理製剤を調製した。

処理方法：手動式散布器を用いて、調製した処理製剤を成熟期のトマトに収穫 10 日前及び 3 日前に、1 回あたり 375 g ai/ha (1000~1500 L/ha) で計 2 回散布した。実際に処理した量を計算すると、計 752 g ai/ha (フェニル標識体) および 767 g ai/ha (イソプロピル標識体) であった。¹⁾

1) 申請者注：処理量について

ジェトフェンカルブのトマトにおける単回施用量は 37.5 g ai/10 a [ゲッター水和剤 (12.5%)、1000~1500 倍希釈、100~300L/10 a、5 回] である。本試験で採用した処理量は 37.5~38.9 g ai/10 a/回であり単回施用量と等しい。

採取時期：最終散布 3 日後にトマト果実を採取した。

分析方法：果実試料の分析方法のスキームを図 1 に示した。

ジエトフェンカルブおよびその代謝物は、標品との HPLC および TLC コクロマトグラフィーにより同定・定量した。

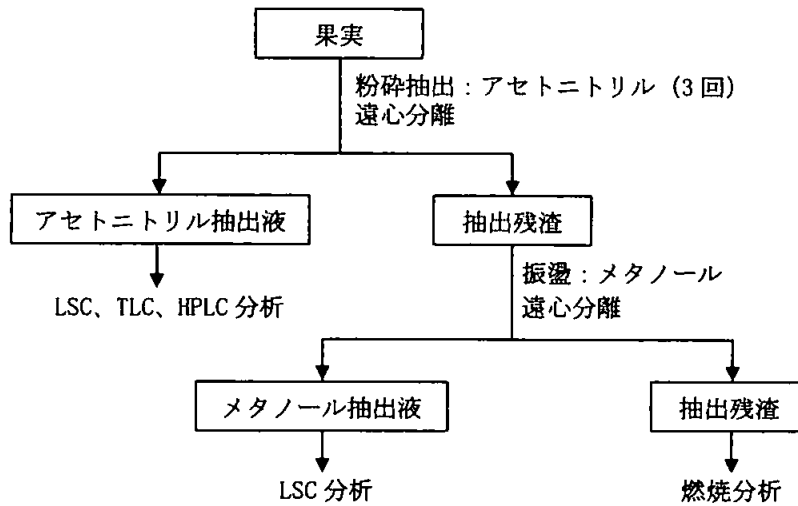


図 1 果実の抽出および分析スキーム

試験結果：

^{14}C 分布：トマト果実における ^{14}C 分布を表 1 に示した。

トマト果実における総残留放射能 (TRR) 濃度は、0.085~0.116 ppm であった。94.83~98.82%TRR がアセトニトリル抽出液中に存在し、メタノール抽出液中に検出された放射能はごく微量 (< 0.005%TRR) で、抽出残渣中の放射能は 1.18~5.17%TRR であった。

表 1 トマト果実における ^{14}C 分布

画分	フェニル標識体		イソプロピル標識体	
	%TRR ^a	ppm ^b	%TRR	ppm
アセトニトリル抽出液	94.83	0.110	98.82	0.084
メタノール抽出液 ^c	0.00	0.000	0.00	0.000
抽出残渣	5.17	0.006	1.18	0.001
合計	100	0.116	100	0.085

a: トマト果実中の総残留放射能 (TRR) に対する割合 (%)

b: ジエトフェンカルブ換算値

c: メタノール抽出液中の放射能は、< 0.005%TRR (< 0.005 ppm) であった。

代謝： トマト果実における代謝物分析の結果を表 2 に示した。

主要残留物は未変化のジエトフェンカルブであり、69.0~72.9%TRR 検出された。代謝物として、4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC、4-OH-DFC および/あるいは DFC-COOH、4-Glc-5-TLA-DFC あるいは 4-Glc-DFC、および DPO が同定されたが、いずれも 2.6%TRR (0.003 ppm) 以下であった。高極性の未同定代謝物 1 がフェニル標識体から 6.9%TRR (0.008 ppm)、イソプロピル標識体から 11.8%TRR (0.010 ppm) 検出された。他にも未同定代謝物が検出されたが、それぞれ 0.001 ppm 以下であった。

表 2 トマト果実における代謝物分布

化合物	フェニル標識体		イソプロピル標識体	
	%TRR ^a	ppm ^b	%TRR	ppm
DFC	69.0	0.080	72.9	0.062
4-Glc-5-TLA-DFC あるいは 4-Glc-DFC	2.6	0.003	ND	ND
4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC	1.7	0.002	2.4	0.002
4-OH DFC および/あるいは DFC-COOH	2.6	0.003	2.4	0.002
DPO	0.9	0.001	1.2	0.001
未同定代謝物 1 (Rt 3.25 min) ^c	6.9	0.008	11.8 ^d	0.010 ^d
未同定代謝物 2 (Rt 19.25 min)	1.7	0.002	ND	ND
その他の未同定成分	各≤0.9	各≤0.001	各≤1.2	各≤0.001
合計	94.83	0.110	98.82	0.084

ND：検出せず

a：トマト果実中の総残留放射能 (TRR) に対する割合 (%)

b：ジエトフェンカルブ換算値

c：Rt は HPLC 保持時間。

d：未同定代謝物 1 はイソプロピル標識体処理区で 0.010 ppm, 11.8%検出されているが、報告書の HPLC クロマトグラムの形状からカラムに保持されない複数成分の集合体であると考えられる。

推定代謝経路：ジエトフェンカルブのトマトにおける推定代謝経路を図 2 に示した。

ジエトフェンカルブはフェニル環 4 位のエトキシ基の脱エチル化を経て、グルコース抱合化、もしくはフェニル環 5 位のグルタチオン由来によるメルカプト乳酸抱合化により代謝された。後者はさらに、フェニル環 4 位もしくはメルカプト乳酸の水酸基がグルコース抱合されると考えられた。また、イソプロピルメチル基が酸化されてカルボン酸を生成し続いて分子内環化する経路も存在した。

図2 ジェトフェンカルブのトマトにおける推定代謝経路

(5) ジェトフェンカルブのレタスにおける代謝試験

(資料 II-5)

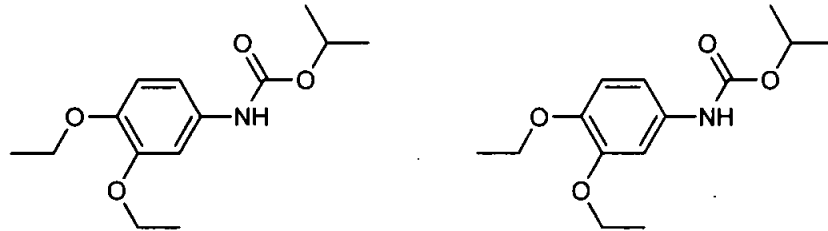
試験機関：Covance Laboratories Ltd

[GLP 対応]

報告書作成年：2006 年

供試標識化合物：[フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ
[イソプロピル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

構造式：



*：標識位置

化学名：イソプロピル 3,4-ジエトキシカルバネート

	フェニル標識体	イソプロピル標識体
標識位置		
比放射能		
放射化学的純度		

供試植物：レタス（品種：Saladin）

プラスチック製容器（約 35 L 容、表面積 0.2 m²）に播種し、屋外で収穫まで栽培した。標識体処理前に 1 容器あたり 2 本の苗になるように間引きを行った。

方法：

処理液の調製：各標識体をアセトニトリル中で混合して同位体希釈を行った。得られた溶液を窒素気流下で濃縮乾固し、水和剤（WP）の空製剤を加えた後に水で希釈して処理液を調製した。

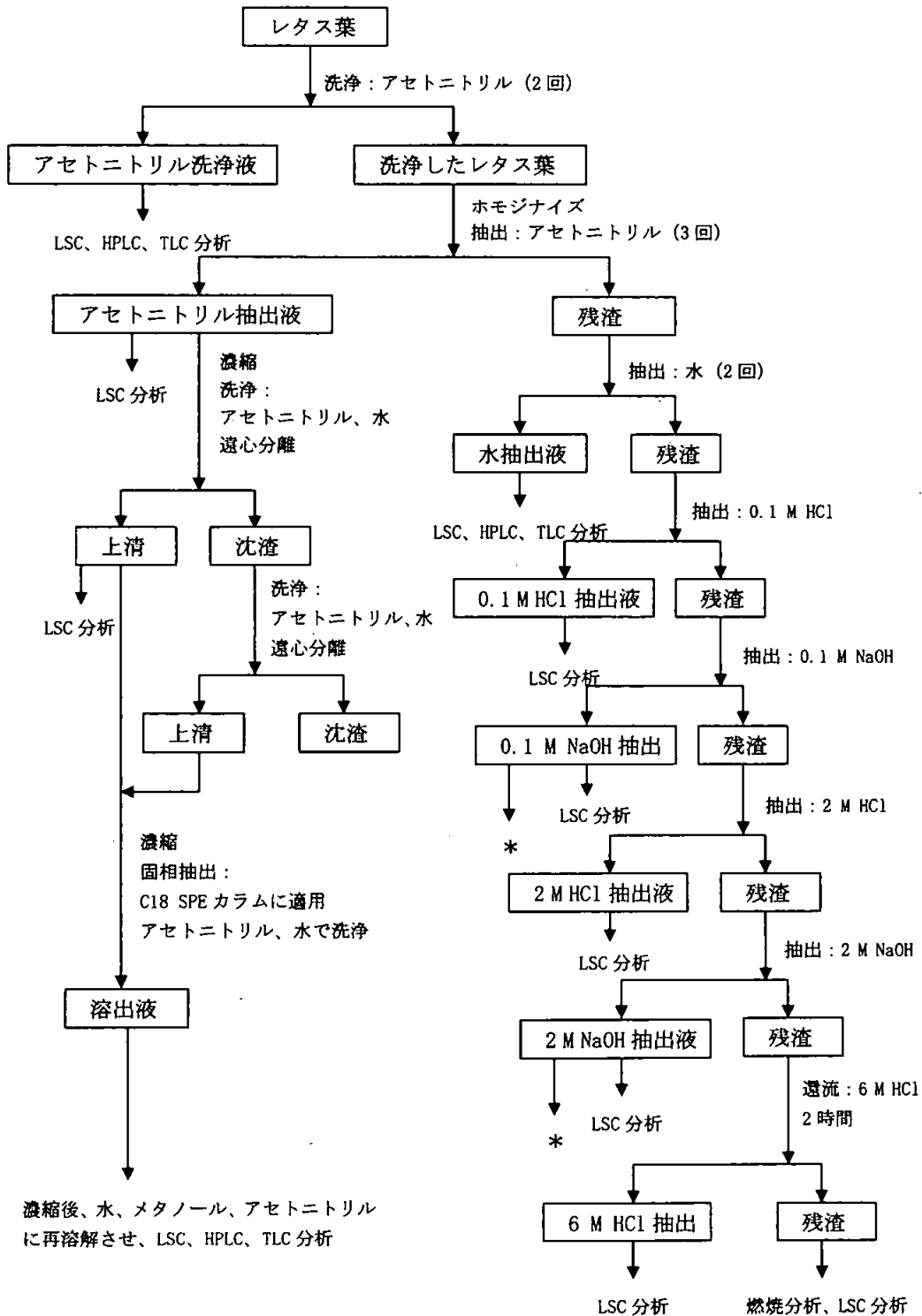
処理方法：調製した処理液（40 mL）をレタスに7日間隔で計5回散布処理した。最終散布は収穫7日前に行い、1回あたりの処理量は約0.38 kg a. i. /ha¹⁾であった。

試料採取：最終散布7日後に、成熟したレタス（生育段階 BBCH49、播種後78日）を土壌表面から約1 cmの茎を切断して収穫した。

分析方法：レタス葉の抽出および分析方法のスキームを次頁に示した。

1) 申請者注：処理量について

ジェットフェンカルブのレタスにおける単回施用量は37.5 g ai/10 a [スミブレンド水和剤（12.5%）、1000～2000倍、150～300L/10 a、5回]である。本試験で採用した処理量は38 g ai/10 aであり、単回施用量と等しい。



表面洗浄液、アセトニトリル抽出液および水抽出液は、HPLC および TLC 分析に供し、標品とのクロマトグラフィーにより代謝物の同定を行った。

結果：

¹⁴C 分布：収穫したレタス葉における ¹⁴C 分布を表 1 に示した。

レタス葉の総残留放射能 (TRR) 濃度は、1.76~2.02 ppm であった。残留放射能のうち、44~49%TRR が表面洗浄液中に、32~37%TRR がアセトニトリル抽出液中に、4~5%TRR が水抽出液中に、3~4%TRR が弱酸および弱アルカリ抽出液中に回収された。さらに 2 M の酸およびアルカリを用いた浸漬抽出により、2%TRR が回収され、6 M の酸での還流により 2~4%TRR が回収され、最終的な抽出残渣は 6~9%であった。

表 1 レタス葉における総残留放射能の分布

画分	フェニル標識体		イソプロピル標識体	
	%TRR ^a	(ppm) ^b	%TRR ^a	(ppm) ^b
表面洗浄液	48.9	(0.989)	44.1	(0.776)
アセトニトリル抽出液	31.7	(0.641)	36.5	(0.642)
水抽出液	4.5	(0.090)	4.1	(0.072)
0.1 M 塩酸抽出液	0.7	(0.015)	0.5	(0.009)
0.1 M 水酸化ナトリウム抽出液			3.0	(0.052)
[水層]	2.4	(0.049)	[1.9	(0.033)]
[有機層]			[1.0	(0.018)]
2 M 塩酸抽出液	1.0	(0.020)	0.7	(0.013)
2 M 水酸化ナトリウム抽出液			0.9	(0.015)
[水層]	0.9	(0.017)	[0.6	(0.010)]
[有機層]			[0.3	(0.005)]
6 M 塩酸抽出液	4.3	(0.086)	1.6	(0.028)
抽出残渣	5.7	(0.115)	8.6	(0.151)
合計	100	(2.023)	100	(1.760)

a：総残留放射能に対する割合

b：ジエトフェンカルブ換算濃度

代謝：レタス葉の表面洗浄液、アセトニトリル抽出液および水抽出液中のジエトフェンカルブおよび代謝物残留量を表 2 に示した。

レタスにおける主要成分は未変化のジエトフェンカルブであり、TRR の 52~57% を占めた。

代謝物として、表面洗浄液中に 4-OH-DFC が、アセトニトリル抽出液中に 4-Glc-DFC、4-Glc-5-TLA-DFC、4-OH-5-TLA-DFC および 4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC が暫定的に同定された。これら代謝物はいずれも微量 (2%TRR 未満) であった。また、これら代謝物は、両標識体で共通していたことから、カーバメイト結合の開裂はほとんどないと推察された。

他に、アセトニトリル抽出液中には、17 個に及ぶ未同定代謝物が 16~21%TRR (最大成分は 3.6%TRR) 存在し、水抽出液中には、13 個に及ぶ未同定代謝物が 3~4%TRR (最大成分は 1.2%TRR) 存在した。

表 2 レタス葉の表面洗浄液、アセトニトリル抽出液および水抽出液におけるジエトフェンカルブおよび代謝物残留量

化合物	フェニル標識体		イソプロピル標識体	
	%TRR ^a	(ppm) ^b	%TRR ^a	(ppm) ^b
表面洗浄液				
ジエトフェンカルブ	47.3	(0.957)	43.0	(0.757)
4-OH-DFC	0.5	(0.010)	0.3	(0.005)
未同定代謝物	0.6	(0.012)	0.3	(0.006)
分離されない放射能 ^c	0.5	(0.010)	0.5	(0.008)
アセトニトリル抽出液				
ジエトフェンカルブ	9.9	(0.201)	9.0	(0.158)
4-Glc-DFC/4-Glc-5-TLA-DFC	0.9	(0.019)	1.9	(0.033)
4-OH-5-TLA-DFC	0.6	(0.013)	ND	
4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC	ND		0.6	(0.011)
未同定代謝物 ^d	16.3	(0.330)	21.2	(0.372)
分離されない放射能 ^c	4.0	(0.078)	3.8	(0.068)
水抽出液				
未同定代謝物 ^a	3.1	(0.063)	4.1	(0.071)
分離されない放射能 ^c	1.4	(0.028)	<0.1	(0.001)

ND: 検出せず

a: 総残留放射能に対する割合

b: ジエトフェンカルブ換算濃度

c: Unresolved Background と Undifferential Region の合計値

d: フェニル標識体では 15 成分より構成され、そのうちの最大成分は 0.051 ppm (2.5%TRR) であった。イソプロピル標識体では 17 成分より構成され、そのうちの最大成分は 0.063 ppm (3.6%TRR) であった。

推定代謝経路：ジエトフェンカルブのラタスにおける推定代謝経路を図1に示した。

ジエトフェンカルブはラタスにおいて、フェニル環の4位のエトキシ基の脱エチル化を経て、グルコース抱合化、もしくはフェニル環5位のグルタチオン由来によるメルカプト乳酸抱合化により代謝された。後者はさらにフェニル環4位もしくはメルカプト乳酸の水酸基がグルコース抱合されると考えられた。

図1 ジェトフェンカルブのレタスにおける推定代謝経路

(6) 土壌中分解物 6-NO₂-DFC のきゅうりへの吸収移行試験

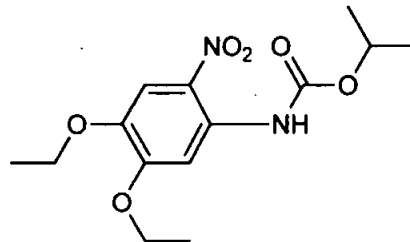
(資料 II-6)

試験機関：住友化学工業株式会社

報告書作成年：1988年

供試標識化合物：[フェニル-¹⁴C]6-NO₂-DFC

構造式：



*：標識位置

化学名：isopropyl 4,5-diethoxy-2-nitrocarbanilate

放射化学的純度：

比放射能：

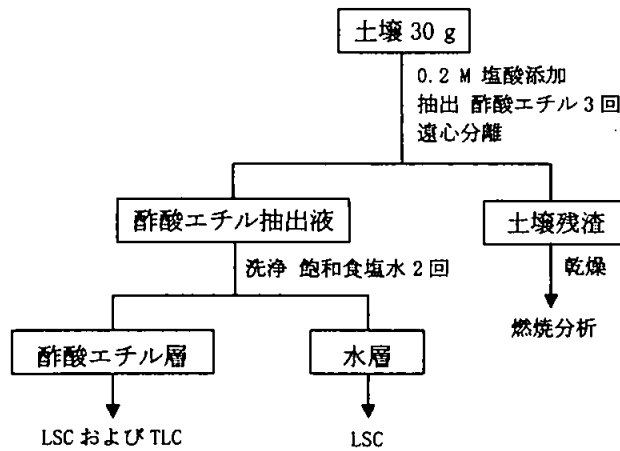
供試植物：きゅうり（温室栽培）

供試土壌：下記の土壌を使用した。

土壌名	宝塚土壌
採取場所	兵庫県宝塚市
土性	砂質壤土
砂 (%)	78
シルト (%)	8
粘土 (%)	14
粘土鉱物	カオリナイト
有機物含量 (%)	1.7
陽イオン交換容量 (meq/100 g 乾土)	4.9
pH (H ₂ O)	5.9
リン酸吸収係数 (g/100 g 乾土)	343
最大容水量 (g/100 g 乾土)	36.8

試験方法：フェニル標識体のメタノール溶液を乾土当り 0.1 ppm (6-NO₂-DFC の土壌残留値 (圃場) の約 5 倍相当濃度) になるように土壌に混和处理した後、第 2 本葉期のきゅうり苗を移植し、収穫期まで (約 2 ヶ月間) 自然光が入射する温室内で

栽培した。きゅうりは、処理後 58 日および 62 日に、果実および茎葉部に分けて採取し、細断して均一化および風乾後、燃焼分析に供した。土壌は処理直後および処理後 62 日に採取し、次頁のスキームに従い抽出し分析した。



試験結果：きゅうりに移行した放射エネルギーを表 1 に、土壌中の放射能分布を表 2 に示した。収穫期のきゅうり果実中および茎葉部の放射能濃度はそれぞれ検出限界 (0.0008 ppm) 未満および 0.0027 ppm であり、6-NO₂-DFC は土壌からきゅうりへ殆ど取り込まれないことが示された。収穫期 (処理 62 日後) の土壌から 99.2% TAR (%TAR : 処理放射能に対する割合) の放射能が回収された。そのうち 81.1% TAR が 6-NO₂-DFC として残存し、残りの放射能の大部分は土壌残渣に存在した。2 個の未知代謝物が認められたが、いずれも微量であった。

表 1 きゅうり果実および茎葉部の放射エネルギー

	果実	茎葉部*
処理量に対する割合 (%)	< 0.019	0.068
6-NO ₂ -DFC 換算濃度 (ppm)	< 0.0008	0.0027

*数値は 2 連の平均値

表2 処理土壌における放射能分布

画分	処理直後		処理 62 日後	
	処理量に対 する割合 (%)	¹⁴ C 濃度 ¹⁾ (ppm)	処理量に対 する割合 (%)	¹⁴ C 濃度 (ppm)
酢酸エチル層	102.5	0.1021	84.5	0.0842
6-NO ₂ -DFC	102.0	0.1016	81.1	0.0808
未知代謝物 M-1	<0.1	<0.0001	0.3	0.0003
未知代謝物 M-2	<0.1	<0.0001	0.3	0.0003
その他	0.6	0.0006	2.8	0.0028
水層	<0.1	<0.0001	<0.1	<0.0001
土壌残渣	3.3	0.0030	14.7	0.0147
合計	105.8	0.1051	99.2	0.0989

数値は 2 連の平均値、¹⁴6-NO₂-DFC 換算濃度

3. 土壤中動態に関する試験

(1) ジェトフェンカルブの好氣的土壤中動態試験

(資料 III-1)

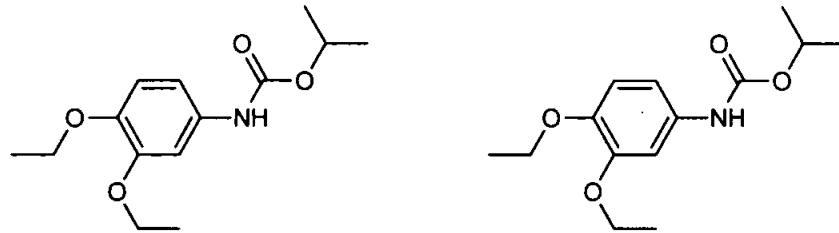
試験機関：住友化学工業株式会社

報告書作成年：1988年

供試標識化合物：[フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

[イソプロピル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

化学構造：



*：標識位置

化学名：イソプロピル=3,4-ジエトキシカルブネート

	フェニル標識体	イソプロピル標識体
標識位置		
比放射能		
放射化学的純度		

供試土壌：下表記載の畑地土壌を使用した。

土壌名	牛久土壌	安土土壌
採取場所	茨城県牛久市	滋賀県蒲生郡安土町
土性	壤土	砂壤土
砂 (%)	56.0	70.0
シルト (%)	38.5	17.5
粘土 (%)	5.5	12.5
粘土鉱物	アロフェン	カオリナイト イライト
有機物含量 (%)	3.2	0.8
陽イオン交換容量 (me/100 g 乾土)	21.5	8.1
pH (H ₂ O)	6.9	5.1
最大容水量 (g/100 g 乾土)	125.7	51.5

試験方法：土壌は使用前に 2 mm の篩を通した。好氣的条件の試料は、土壌 30 g (乾土相当) を 50 mL 容ビーカーに入れ、0.33 bar での容水量の 75% に水分調整し、 $25\pm 2^{\circ}\text{C}$ の暗条件下で 2 週間ブレインキュベートした後、各標識体のメタノール溶液 100 μL を乾土当り 0.5 ppm¹ の濃度となるよう添加して混合することにより調製した。試料には CO_2 を除去した空気を連続通気し、 $25\pm 2^{\circ}\text{C}$ の暗条件下で 270 日間インキュベートした。揮散性物質はポリウレタンおよび 0.5 M 水酸化ナトリウム水溶液で捕集し、ポリウレタンはメタノール 30 mL で 3 回抽出して、メタノール抽出液および水酸化ナトリウム水溶液中放射能を測定した。また、水酸化ナトリウム水溶液に 1 M 塩化バリウム水溶液を添加し、遠心分離後の上清を LSC 分析に供することにより $^{14}\text{CO}_2$ を定量した。

滅菌条件下の試料は土壌をオートクレーブ滅菌し、0.33 bar での容水量の 75% に滅菌水で水分調整し、アジ化ナトリウムを 100 ppm の濃度で添加した後、好氣的条件の試料と同様に処理して、 $25\pm 2^{\circ}\text{C}$ の暗条件下で 30 日間インキュベートした。

嫌氣的条件下の試料は、0.33 bar での容水量の 75% に水分調整し嫌氣性システム内、 $27\pm 2^{\circ}\text{C}$ の暗条件下で 2 週間ブレインキュベートした後、嫌氣的条件下において、好氣的条件の試料と同様に処理して、 $27\pm 2^{\circ}\text{C}$ の暗条件下で 60 日間インキュベートした。

各試料を以下の日程で採取し、下記のスキームに従って抽出した。代謝分解物の同定および定量は TLC 分析を用いて実施した。好氣的条件下における推定半減期は最小二乗法により求めた。

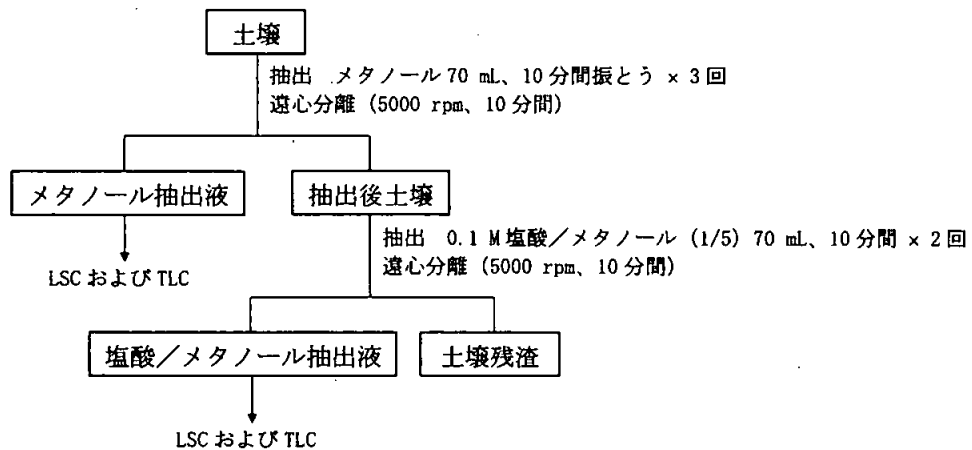
試料採取時期：

好氣的条件： 処理 1、3、7、14、30、60、90、120、180、および 270 日後

滅菌条件： 処理 1、3、7、14、および 30 日後

嫌氣的条件： 処理 1、3、7、14、30、および 60 日後

¹申請者注：この処理濃度はジエトフェンカルブ含有製剤における最大施用量 87.5 g ai/10 a [みかん：ゲッター®水和剤(12.5%)、1000 倍希釈、700 L/10 a] の 0.6 倍量に相当する。



好氣的条件の試料の土壌残渣は、ヒューミン、フミン酸およびフルボ酸に分離して、結合性 ^{14}C の化学的特徴付けを行った。フルボ酸画分は酢酸エチルで 2 回抽出し、有機層および水層中放射能を測定し、有機層は濃縮後 TLC 分析に供した。

試験結果：各条件下におけるジエトフェンカルブ量の経時変化を表 1 に示した。好氣的条件下におけるジエトフェンカルブの推定半減期を表 2 に示した。好氣的条件下における放射能分布および代謝分解物の経時変化を表 3-1~3-4 に示した。また滅菌条件下および嫌氣的条件下における放射能分布の経時変化を、それぞれ表 4 および表 5 に示した。

好氣的条件下におけるジエトフェンカルブの推定半減期は、両標識体とも牛久土壌で 6.2 日、安土土壌で 0.3 日であった。処理 270 日後のジエトフェンカルブの残留量は、牛久土壌で両標識体とも 0.3% TAR (%TAR: 総処理量に対する割合)、安土土壌で両標識体とも 0.1% TAR 未満であった。一方、滅菌条件および嫌氣的条件下では、最終試料採取日 (処理 30 日後および 60 日後) に、それぞれ 86.4~94.8% TAR および 60.0~70.5% TAR が残存していた。分解速度は好氣的条件、嫌氣的条件、滅菌条件の順に速く、分解は主に好氣性土壌微生物によるものと考えられた。

好氣的条件下の土壌抽出液中に 6 個の分解物が検出され、標識体間の相異はなかった。安土土壌における主要分解物はフェニル環の 6 位がニトロ化された 6- NO_2 -DFC であり、生成量は試験期間中 2.4~4.7% TAR であったが、牛久土壌では試験期間を通して 0.2% TAR 以下であった。他の微量分解物は同定できなかったが、両標識体で検出されていることからカーバメート部分を有すると考えられ、また土壌への蓄積傾向はみられなかった。揮散性物質量は、両標識体および両土壌中において経時的に増加し、その大部分が CO_2 であり、処理 270 日後の生成量は 30.5~57.0% TAR であった。結合性 ^{14}C は、フェニルおよびイソプロ

ピル標識体について、牛久土壌ではそれぞれ最大 73.5% TAR (処理 60 日後) および 43.2% TAR (処理 30 日後)、安土土壌ではそれぞれ最大 60.6% TAR (処理 7 日後) および 48.3% TAR (処理 3 日後) であった。

滅菌条件下では、ジエトフェンカルブはほとんど分解されず、処理 30 日後において牛久および安土土壌で 86.4~87.4% および 94.0~94.8% が検出された。試験期間を通して、6-NO₂-DFC は 0.2% TAR 以下であり、その他の分解物は合計で 1.2% TAR 以下であった。塩酸/メタノール抽出液中放射能は経時的に増加し、牛久および安土土壌においてそれぞれ処理 30 日後に約 7% TAR および約 3% TAR となった。結合性 ¹⁴C は、牛久および安土土壌においてそれぞれ処理 30 日後に約 5% TAR および約 1% TAR であった。

嫌気的条件下ジエトフェンカルブは処理 60 日後に牛久および安土土壌において 66.2~70.5% および 60.0~60.8% に減少し、試験期間を通じて 6-NO₂-DFC は検出されなかった。結合性 ¹⁴C は、フェニルおよびイソプロピル標識体について、それぞれ 26.4~28.6% TAR および 11.5~12.4% TAR であった。結合性 ¹⁴C がフェニル標識体処理試料でより多く、物質収支はイソプロピル標識試料において徐々に減少したことから、ジエトフェンカルブは嫌気性土壌微生物によっても分解され、揮散性物質はイソプロピル部分から生成すると考えられた。

ジエトフェンカルブの好氣的土壌中における推定代謝分解経路を図 1 に示した。ジエトフェンカルブは好氣的土壌中で速やかに分解し、フェニル環の 6 位がニトロ化された 6-NO₂-DFC が生成した。また、C-N 結合の開裂に次いで、アニリン部分およびイソプロピル部分が最終的に CO₂ まで無機化されるか、または土壌成分に取り込まれることも示唆された。

表1 各条件下でのジェットフェンカルブ量の経時変化

条件	土壌	標識体	処理量に対する割合 (%)										
			処理後日数										
			0	1	3	7	14	30	60	90	120	180	270
好氣的	牛久	フェニル	99.8	89.2	68.6	43.4	21.1	7.4	3.0	2.3	1.6	0.8	0.3
		イソプロピル	99.3	90.2	71.9	42.4	21.1	7.2	3.2	2.1	1.3	0.8	0.3
	安土	フェニル	95.0	7.9	2.9	0.8	0.5	0.2	0.2	0.1	0.1	<0.1	<0.1
		イソプロピル	92.9	12.6	3.7	1.0	0.6	0.2	0.2	0.1	0.1	<0.1	<0.1
嫌氣的	牛久	フェニル	—	95.8	94.0	86.8	78.2	68.8	66.2	—	—	—	—
		イソプロピル	—	96.0	95.0	87.7	83.1	76.3	70.5	—	—	—	—
	安土	フェニル	—	90.5	87.0	79.2	72.4	61.8	60.8	—	—	—	—
		イソプロピル	—	94.6	86.3	87.2	79.1	68.8	60.0	—	—	—	—
滅菌	牛久	フェニル	—	95.1	93.4	92.9	90.6	86.4	—	—	—	—	—
		イソプロピル	—	95.2	94.6	93.2	90.9	87.4	—	—	—	—	—
	安土	フェニル	—	97.6	97.6	97.4	95.2	94.0	—	—	—	—	—
		イソプロピル	—	98.4	98.5	95.9	96.7	94.8	—	—	—	—	—

数値はメタノール抽出液および塩酸/メタノール抽出液中のジェットフェンカルブ量の合計
—：適用なし

表2 好氣的条件下におけるジェットフェンカルブの推定半減期

土壌	推定半減期	
	フェニル標識体	イソプロピル標識体
牛久 ^a	6.2日 ($r^2 = 0.998$) ^c	6.2日 ($r^2 = 0.997$)
安土 ^b	0.3日 ($r^2 = 1.000$)	0.3日 ($r^2 = 1.000$)

a：表1の0～14日のジェットフェンカルブ量を用いて、最小二乗法により計算。

b：表1の0～1日のジェットフェンカルブ量を用いて、最小二乗法により計算。

c： r^2 は相関係数を示す。

表 3-1 フェニル標識体を処理した好氣的条件下の牛久土壌における放射能分布および分解物の経時変化

処理後日数	処理量に対する割合 (%)									
	1	3	7	14	30	60	90	120	180	270
揮散性 ¹⁴ C	<0.1	0.2	1.6	4.2	8.7	18.7	22.0	24.2	28.2	30.7
NaOHトラップ*	<0.1	0.2	1.6	4.2	8.7	18.7	22.0	24.2	28.2	30.7
¹⁴ CO ₂	<0.1	0.2	1.6	4.2	8.7	18.7	22.0	24.2	28.1	30.5
その他	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	0.1	0.2
ポリアリケントラップ*	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
抽出性 ¹⁴ C	91.1	70.8	46.7	24.2	10.4	4.7	3.7	2.9	3.7	1.4
メタノール抽出液	89.6	67.8	43.6	22.1	8.8	3.6	2.6	2.2	1.3	1.1
ジエトフェンカルブ*	88.5	66.2	41.3	19.8	6.8	2.5	1.6	1.3	0.1	0.3
6-NO ₂ -DFC	0.1	0.1	0.2	0.2	0.1	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1
M-3	0.2	0.1	0.2	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1
M-5	0.1	0.3	0.3	0.3	0.2	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1
原点	0.3	0.3	0.5	0.5	0.4	0.4	0.4	0.3	0.1	0.3
その他	0.4	0.8	1.1	1.2	1.2	0.4	0.3	0.3	1.1	0.5
塩酸/メタノール抽出液	1.5	3.0	3.1	2.1	1.6	1.1	1.1	0.7	2.4	0.3
ジエトフェンカルブ*	0.7	2.4	2.1	1.3	0.6	0.5	0.7	0.3	0.7	<0.1
原点	0.6	0.2	0.4	0.4	0.3	0.4	0.2	0.3	1.1	0.2
その他	0.2	0.4	0.6	0.4	0.7	0.2	0.2	0.1	0.6	0.1
結合性 ¹⁴ C	8.9	25.4	46.8	63.4	69.6	73.5	69.5	68.9	63.4	66.2
ヒューミン	—	7.3	14.5	19.1	21.1	23.9	22.4	22.5	20.7	21.6
アミン酸	—	8.9	17.0	24.7	27.1	26.5	25.0	25.5	23.1	21.6
フルボ酸	—	9.2	15.3	19.6	21.4	23.1	22.1	20.9	19.6	23.0
抽出液	—	3.4	5.4	6.1	6.6	6.5	5.9	5.9	5.3	6.8
ジエトフェンカルブ*	—	1.5	1.9	2.2	1.7	1.3	1.2	1.1	0.9	<0.1
その他	—	1.9	3.5	3.9	4.9	5.2	4.7	4.8	4.4	6.8
非抽出性 ¹⁴ C	—	5.8	9.9	13.5	14.8	16.6	16.2	15.0	14.3	16.2
合計 ¹⁴ C	100.0	96.4	95.1	91.8	88.7	96.9	95.2	96.0	95.3	98.3

— : 適用なし

表 3-2 イソプロピル標識体を処理した好氣的条件下の牛久土壌における放射能分布
および分解物の経時変化

処理後日数	処理量に対する割合 (%)									
	1	3	7	14	30	60	90	120	180	270
揮散性 ¹⁴ C	0.2	1.1	9.3	17.7	29.1	32.8	37.8	40.6	46.3	49.1
NaOHトラップ	0.2	1.1	9.3	17.7	29.1	32.8	37.8	40.6	46.3	49.1
¹⁴ CO ₂	0.2	1.1	9.3	17.7	29.1	32.8	37.8	40.3	45.6	48.3
その他	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	0.3	0.7	0.8
ボリウレタントラップ	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
抽出性 ¹⁴ C	91.8	73.7	44.7	23.6	10.0	4.6	3.4	2.2	1.8	0.9
メタノール抽出液	90.2	70.6	41.6	21.6	8.4	3.6	2.4	1.7	1.2	0.7
ジエトフェンカルブ	89.4	69.3	40.1	20.1	6.7	2.8	1.7	1.1	0.6	0.3
6-NO ₂ -DFC	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
M-3	0.2	0.2	0.2	0.2	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1	<0.1
M-5	0.1	0.2	0.3	0.3	0.2	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1
原点	0.2	0.2	0.4	0.3	0.3	0.3	0.3	0.2	0.1	0.1
その他	0.3	0.7	0.6	0.7	1.1	0.3	0.2	0.3	0.5	0.3
塩酸/メタノール抽出液	1.6	3.1	3.1	2.0	1.6	1.0	1.0	0.5	0.6	0.2
ジエトフェンカルブ	0.8	2.6	2.3	1.0	0.5	0.4	0.4	0.2	0.2	<0.1
原点	0.7	0.2	0.3	0.6	0.3	0.4	0.5	0.2	0.3	0.2
その他	0.1	0.3	0.5	0.4	0.8	0.2	0.1	0.1	0.1	<0.1
結合性 ¹⁴ C	6.5	16.9	32.6	42.0	43.2	42.4	36.5	36.1	31.1	29.3
ヒューシ	—	4.0	9.6	13.9	15.1	16.9	14.8	14.8	13.5	12.4
フミン酸	—	2.9	6.3	8.6	10.3	10.4	9.0	8.7	8.2	7.7
フルボ酸	—	10.0	16.7	19.5	17.8	15.1	12.7	12.6	9.4	9.2
抽出液	—	4.5	7.3	8.6	8.2	7.5	6.1	6.1	4.3	4.0
ジエトフェンカルブ	—	2.8	3.1	3.9	3.6	2.7	1.7	1.7	0.9	<0.1
その他	—	1.7	4.2	4.7	4.6	4.8	4.4	4.4	3.4	4.0
非抽出性 ¹⁴ C	—	5.5	9.4	10.9	9.6	7.6	6.6	6.5	5.1	5.2
合計 ¹⁴ C	98.5	91.7	86.6	83.3	82.3	79.8	77.7	78.9	79.2	79.3

— : 適用なし

表 3-3 フェニル標識体を処理した好氣的条件下の安土土壤における放射能分布および分解物の経時変化

処理後日数	処理量に対する割合 (%)									
	1	3	7	14	30	60	90	120	180	270
揮散性 ¹⁴ C	5.5	12.4	16.1	21.3	26.6	40.2	43.8	46.6	53.9	58.7
NaOHトラップ	5.5	12.4	16.1	21.3	26.6	40.2	43.8	46.6	53.9	58.7
¹⁴ CO ₂	5.5	12.3	16.0	21.1	26.3	39.9	43.4	45.9	52.3	57.0
その他	<0.1	0.1	0.1	0.2	0.3	0.3	0.4	0.7	1.6	1.7
ポリウレタントラップ	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
抽出性 ¹⁴ C	32.6	22.8	17.4	15.4	12.9	12.0	9.6	9.9	10.6	6.6
メタノール抽出液	24.3	15.8	11.4	10.3	8.5	7.6	6.1	6.9	7.9	4.2
ジエトフェンカルブ	7.8	2.8	0.7	0.4	0.2	0.2	0.1	0.1	<0.1	<0.1
6-NO ₂ -DFC	3.8	3.8	4.1	3.7	3.4	3.7	3.0	3.7	4.1	2.4
M-2	<0.1	<0.1	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	<0.1
M-3	1.7	0.6	0.2	0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
M-4	1.5	1.1	0.3	0.2	0.1	0.1	<0.1	0.1	<0.1	<0.1
M-6	1.2	0.3	0.2	0.3	0.2	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1
原点	5.0	4.3	4.3	3.9	2.9	2.5	2.2	2.1	2.3	1.1
その他	3.3	2.9	1.4	1.5	1.5	0.8	0.4	0.6	1.3	0.7
塩酸/メタノール抽出液	8.3	7.0	6.0	5.1	4.4	4.4	3.5	3.0	2.7	2.4
ジエトフェンカルブ	0.1	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
6-NO ₂ -DFC	<0.1	0.1	0.1	0.2	0.1	0.2	0.3	0.2	0.3	<0.1
原点	7.5	6.3	5.3	4.2	3.4	3.9	3.0	2.6	1.9	2.2
その他	0.7	0.5	0.5	0.6	0.9	0.3	0.2	0.2	0.5	0.2
結合性 ¹⁴ C	48.5	55.2	60.6	47.5	52.5	43.3	41.4	41.0	29.6	32.7
ヒューシ	7.4	9.1	9.0	7.7	8.3	7.5	7.7	8.2	4.4	5.3
フミン酸	18.9	21.3	26.2	20.5	25.0	19.0	18.8	17.5	12.2	14.2
フルボ酸	22.2	24.8	25.4	19.3	19.2	16.8	14.9	15.3	13.0	13.2
抽出液	7.3	8.4	8.2	5.9	5.9	5.3	4.6	5.0	4.0	4.2
ジエトフェンカルブ	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
その他	7.3	8.4	8.2	5.9	5.9	5.3	4.6	5.0	4.0	4.2
非抽出性 ¹⁴ C	14.9	16.4	17.2	13.4	13.3	11.5	10.3	10.3	9.0	9.0
合計 ¹⁴ C	86.6	90.4	94.1	84.2	92.0	95.5	94.8	97.5	94.1	98.0

表 3-4 イソプロピル標識体を処理した好氣的条件下の安土土壌における放射能分布
および分解物の経時変化

処理後日数	処理量に対する割合 (%)									
	1	3	7	14	30	60	90	120	180	270
揮散性 ¹⁴ C	5.7	13.0	19.9	24.3	29.0	34.4	37.5	39.9	46.1	49.4
NaOHトラップ	5.7	13.0	19.4	23.7	28.4	33.6	36.7	39.1	45.3	48.6
¹⁴ CO ₂	5.7	11.1	17.5	21.4	25.7	30.7	33.6	35.6	40.8	44.0
その他	<0.1	1.9	1.9	2.3	2.7	2.9	3.1	3.5	4.5	4.6
ホリケラントラップ	<0.1	<0.1	0.5	0.6	0.6	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8
抽出性 ¹⁴ C	44.8	26.0	18.7	16.6	13.8	13.1	14.2	10.4	9.8	8.2
メタノール抽出液	36.2	19.1	12.4	10.9	9.3	8.6	9.8	7.5	7.0	6.0
ジエトフェンカルブ	12.5	3.6	0.9	0.5	0.2	0.2	0.1	0.1	<0.1	<0.1
6-NO ₂ -DFC	4.7	3.4	3.6	3.6	3.0	3.0	3.7	2.8	2.5	2.9
M-2	<0.1	<0.1	0.4	0.3	0.3	0.3	0.3	0.2	0.2	<0.1
M-3	2.6	0.9	0.2	0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
M-4	2.3	1.7	0.4	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1
M-6	2.7	0.6	0.3	0.3	0.2	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1
原点	6.9	5.5	4.8	4.5	4.2	4.0	4.8	3.7	3.5	2.4
その他	4.5	3.4	1.8	1.5	1.3	0.9	0.7	0.5	0.8	0.7
塩酸/メタノール抽出液	8.6	6.9	6.3	5.7	4.5	4.5	4.4	2.9	2.8	2.2
ジエトフェンカルブ	0.1	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
6-NO ₂ -DFC	<0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.2	0.2	0.3	<0.1
原点	8.0	6.1	5.6	4.9	3.6	4.0	3.9	2.5	2.2	1.9
その他	0.5	0.6	0.5	0.6	0.8	0.4	0.3	0.2	0.3	0.3
結合性 ¹⁴ C	39.9	48.3	48.2	45.5	48.3	45.9	36.7	35.9	29.3	28.2
ヒューシ	4.3	6.6	7.7	8.4	9.8	11.5	9.3	9.4	5.6	6.1
フミン酸	6.6	8.8	10.7	9.6	11.1	9.9	8.3	9.2	8.7	8.1
フルボ酸	29.0	32.9	29.8	27.5	27.4	24.5	19.1	17.3	15.0	14.0
抽出液	21.2	23.3	20.2	18.0	17.7	15.5	10.9	10.1	7.6	7.1
ジエトフェンカルブ	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
その他	21.2	23.3	20.2	18.0	17.7	15.5	10.9	10.1	7.6	7.1
非抽出性 ¹⁴ C	7.8	9.6	9.6	9.5	9.7	9.0	8.2	7.2	7.4	6.9
合計 ¹⁴ C	90.4	87.3	86.8	86.4	91.1	93.4	88.4	86.2	85.2	85.8

表4 滅菌条件下における放射能分布

牛久土壤	処理量に対する割合 (%)									
	フェニル標識体					イソプロピル標識体				
処理後日数	1	3	7	14	30	1	3	7	14	30
抽出性 ¹⁴ C	98.7	98.5	96.7	96.0	93.8	98.7	99.1	97.4	96.3	94.7
メタノール抽出液	95.8	94.1	93.5	91.0	86.8	95.7	95.0	93.6	91.2	87.8
ジエトフェンカルブ*	95.1	93.4	92.9	90.6	86.4	95.2	94.6	93.2	90.9	87.4
6-NO ₂ -DFC	0.1	0.2	0.1	0.1	<0.1	0.2	0.1	0.1	<0.1	<0.1
原点	0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	0.1	0.1	<0.1	0.1	<0.1
その他	0.5	0.4	0.5	0.2	0.4	0.2	0.3	0.3	0.3	0.4
塩酸/メタノール抽出液	2.9	4.4	3.2	5.0	7.0	3.0	4.1	3.8	5.1	6.9
結合性 ¹⁴ C	1.6	2.2	3.4	3.3	5.3	1.5	2.0	3.3	3.7	5.4
合計 ¹⁴ C	100.3	100.7	100.1	99.3	99.1	100.2	101.2	100.7	100.0	100.1

安土土壤	処理量に対する割合 (%)									
	フェニル標識体					イソプロピル標識体				
処理後日数	1	3	7	14	30	1	3	7	14	30
抽出性 ¹⁴ C	99.3	99.9	100.0	98.2	98.3	100.1	100.8	98.3	99.5	98.9
メタノール抽出液	98.3	98.1	98.5	96.2	95.2	99.1	99.3	96.8	97.5	95.8
ジエトフェンカルブ*	97.6	97.6	97.4	95.2	94.0	98.4	98.5	95.9	96.7	94.8
6-NO ₂ -DFC	0.1	<0.1	0.1	<0.1	<0.1	0.1	0.1	0.1	<0.1	<0.1
原点	0.1	0.1	0.2	0.1	0.2	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
その他	0.5	0.7	0.8	0.9	1.0	0.5	0.6	0.7	0.7	0.9
塩酸/メタノール抽出液	1.0	1.5	1.5	2.0	3.1	1.0	1.5	1.5	2.0	3.1
結合性 ¹⁴ C	0.2	0.3	0.6	0.7	1.0	0.2	0.3	0.5	0.9	0.8
合計 ¹⁴ C	99.5	100.2	100.6	98.9	99.3	100.3	101.1	98.8	100.4	99.7

表5 嫌気的条件下における放射能分布

牛久土壌	処理量に対する割合 (%)											
	フェニル標識体						イソプロピル標識体					
処理後日数	1	3	7	14	30	60	1	3	7	14	30	60
抽出性 ¹⁴ C	96.9	95.4	88.9	80.8	71.9	69.8	96.9	96.0	89.6	84.2	76.9	71.3
メタノール抽出液	93.3	88.0	84.0	74.8	66.3	65.1	93.4	88.5	85.1	78.0	71.9	66.6
ジエトフェンカルブ*	92.6	87.0	82.5	72.9	63.9	62.1	92.9	88.2	84.8	77.6	71.5	66.1
原点	0.2	0.2	0.2	0.2	0.3	0.4	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	0.1
その他	0.5	0.8	1.3	1.7	2.1	0.6	0.5	0.3	0.3	0.4	0.4	0.4
塩酸/メタノール抽出液	3.6	7.4	4.9	6.0	5.6	4.7	3.5	7.5	4.5	6.2	5.0	4.7
ジエトフェンカルブ*	3.2	7.0	4.3	5.3	4.9	4.1	3.1	6.8	2.9	5.5	4.8	4.4
原点	<0.1	0.2	0.2	0.3	0.3	0.3	<0.1	0.3	1.3	0.3	0.1	0.1
その他	0.4	0.2	0.2	0.3	0.3	0.3	0.4	0.4	0.3	0.4	0.1	0.2
結合性 ¹⁴ C	1.9	3.4	9.1	15.6	23.4	26.4	1.4	1.2	5.5	8.2	11.7	11.5
合計 ¹⁴ C	98.8	98.8	98.0	96.4	95.3	96.2	98.3	97.2	95.1	92.4	88.6	82.8

安土土壌	処理量に対する割合 (%)											
	フェニル標識体						イソプロピル標識体					
処理後日数	1	3	7	14	30	60	1	3	7	14	30	60
抽出性 ¹⁴ C	93.1	91.8	85.3	80.4	69.3	66.6	96.4	94.6	89.9	84.4	72.4	63.3
メタノール抽出液	87.3	80.1	74.6	65.8	55.2	53.7	90.3	83.8	78.8	71.2	59.6	52.3
ジエトフェンカルブ*	86.2	78.2	72.4	63.3	53.2	51.6	89.4	83.0	77.9	70.4	58.7	51.3
原点	0.2	0.3	0.4	0.5	0.4	0.6	0.1	0.1	0.1	0.1	0.2	0.2
その他	0.9	1.6	1.8	2.0	1.6	1.5	0.8	0.7	1.8	0.7	0.7	0.8
塩酸/メタノール抽出液	5.8	11.7	10.7	14.6	14.1	12.9	6.1	10.8	11.1	13.2	12.8	11.0
ジエトフェンカルブ*	4.3	8.8	6.8	9.1	8.6	9.2	5.2	3.3	9.3	8.7	10.1	8.7
原点	0.7	1.1	2.1	1.9	2.3	1.4	0.3	4.7	0.5	1.7	1.1	0.4
その他	0.8	1.8	1.8	3.6	3.2	2.3	0.6	2.8	1.3	2.8	1.6	1.9
結合性 ¹⁴ C	1.8	4.7	11.1	15.7	28.7	28.6	1.1	1.4	3.8	5.0	10.6	12.4
合計 ¹⁴ C	94.9	96.5	96.4	96.1	98.0	95.2	97.5	96.0	93.7	89.4	83.0	75.7

図1 ジェトフェンカルブの好氣的土壤中における推定代謝分解経路

4. 水中動態に関する試験

(1) ジェトフェンカルブの加水分解動態試験

(資料 IV-1)

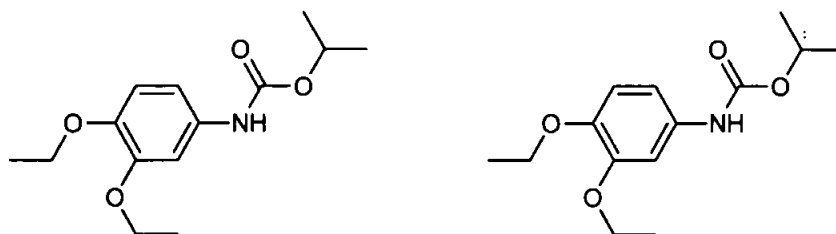
試験機関：住友化学工業株式会社

報告書作成年：1986年

供試標識化合物： [フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

[イソプロピル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

構造式：



*：標識位置

化学名： イソプロピル 3,4-ジエトキシカルバネート

	フェニル標識体	イソプロピル標識体
標識位置		
比放射能		
放射化学的純度		

供試水：5種類 (pH 3、5、7、9および11) の緩衝液を使用した。

pH ^a	5.0 M	1.0 M グリシン + 1.0 M	2.0 M	2.0 M	2.0 M	3.5 M	0.5 M	0.5 M	2.0 M
	NaCl (mL)	NaCl (mL)	HCl (mL)	NaOH (mL)	CH ₃ COONa (mL)	CH ₃ COOH (mL)	Na ₂ HPO ₄ (mL)	NaH ₂ PO ₄ (mL)	酢酸 (mL)
3	32	31.6	4.2						
5	32				20.0	3.7			
7	32						22.7	1.6	
9	10 ^b			21.3					25.0
11	32	19.6		10.2					

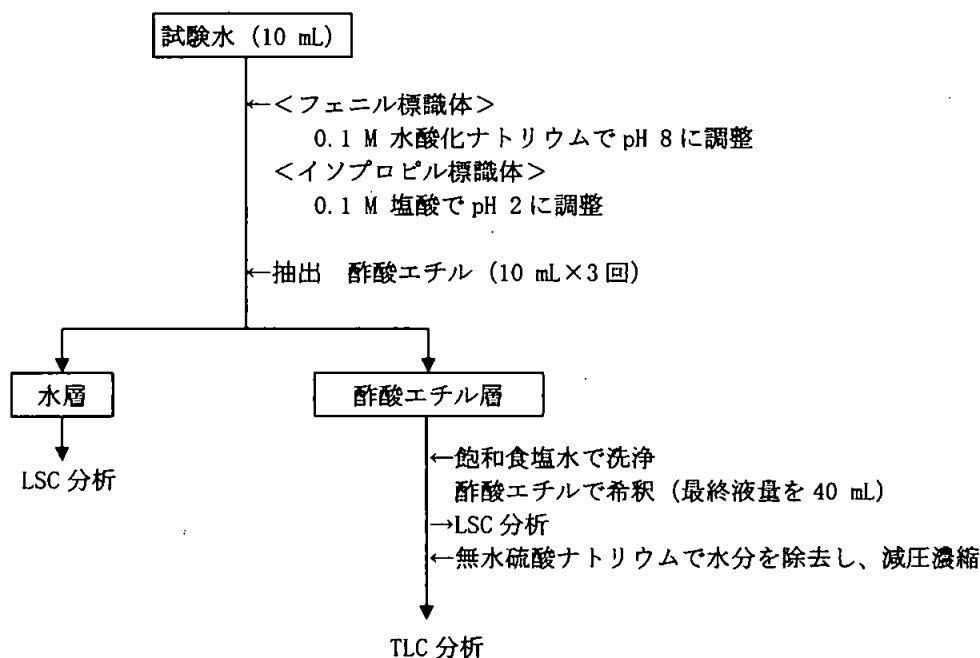
a：イオン強度は0.01に調整した。

調製溶液は蒸留水で希釈して最終液量を2.0 Lとした。

b：NaClの代わりにKClを使用した。

調製した各緩衝液は、オートクレーブで130℃、1時間滅菌して使用した。

試験方法：フェニル標識体あるいはイソプロピル標識体のヘキサン/ベンゼン (3/2) 溶液を加熱滅菌した 100 mL 容量の三角フラスコに移し、窒素ガスにより溶媒を除去した。このフラスコに各緩衝液を 70 mL ずつ添加して密栓し、室温で 1 時間振盪することにより、ジエトフェンカルブの最終濃度が 1 mg/L となるように試験水を調製した。各試験水の入ったフラスコを、25±1℃、40±1℃および 60±1℃で 30 日間、暗条件下で定期的に振盪しながら、インキュベートした。処理直後 (0 日)、7、14、21 および 30 日後に、各試験水 0.5 mL を 2 連で採取し、LSC 分析により試験水中の総放射能を測定後、さらに試験水の一部 (10 mL) を下記のスキームに従って抽出、分析した。



ジエトフェンカルブの半減期は最小二乗法により算出した。

試験結果：

¹⁴C 分布：各試験水中のジエトフェンカルブおよびその分解物の経時的変化を表 1～6 に示した。

分解挙動：ジエトフェンカルブは pH 3、5、7 および 9 の緩衝液中で安定であり、25℃、40℃および 60℃において 30 日経過後で加水分解は僅かしか起こらなかった。pH

11 においては、25℃および 40℃で 30 日経過後の加水分解は極めて僅かであったが、60℃においてのみ加水分解を受け、主要加水分解物として 3,4-ジエトキシアニリン (DEA) が最大 23.8%検出された。

ジエトフェンカルブの 60℃での pH 11 緩衝液中における加水分解経路を図 1 に示した。

推定半減期：フェニル標識体処理の 60℃、pH 11 緩衝液の結果から算出したジエトフェンカルブの半減期は 30.2 日¹であった。pH 3、5、7、9 および 11 緩衝液の 25℃、40℃においてジエトフェンカルブは安定であり、自然水中で通常認められる pH 5～9 領域において加水分解はほとんど起こらないと考えられる。

1 申請者注：pH 11, 60℃における半減期について

本試験報告書中の pH 11, 60℃の半減期について、Summary では「28.4 日」、Results and Discussion では「26.4 日」と異なる値が記載されている。試験報告書中に記載のデータ ([Ph-¹⁴C]ラベル) を使用して再計算を実施したところ半減期は「30.2 日」と算出された。

表1 25°C、pH 3、5、7、9、11 緩衝液中におけるジエトフェンカルブおよびその分解物の経時変化（フェニル標識体）

pH	処理後 時間 (日)	処理放射能に対する割合 (%)					物質収支
		有機抽出層 ¹⁴ C	ジエトフェ ンカルブ	DEA	その他	水層 ¹⁴ C	
3	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	92.1	89.4	-	2.7	0.2	92.3
	14	103.4	102.4	-	1.0	0.4	103.8
	21	103.3	102.0	-	1.3	0.2	103.5
	30	102.4	102.1	-	0.3	0.1	102.5
5	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	99.2	97.1	-	2.1	<0.1	99.2
	14	100.4	99.2	-	1.2	0.1	100.5
	21	98.9	97.9	-	1.0	0.1	99.0
	30	99.8	99.5	-	0.3	0.1	99.9
7	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	102.1	100.6	-	1.5	0.1	102.2
	14	100.5	99.4	-	1.1	0.1	100.6
	21	102.6	101.7	-	0.9	0.2	102.8
	30	101.5	101.1	-	0.4	0.2	101.7
9	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	101.1	100.0	-	1.1	0.1	101.2
	14	100.4	99.5	-	0.9	0.1	100.5
	21	104.5	103.8	-	0.7	0.2	104.7
	30	102.3	102.1	-	0.2	0.2	102.5
11	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	100.0	99.5	-	0.5	0.1	100.1
	14	100.8	100.3	-	0.5	0.1	100.9
	21	102.4	101.6	-	0.8	0.1	102.5
	30	102.6	102.1	-	0.5	0.1	102.7

表2 40°C、pH 3、5、7、9、11 緩衝液中におけるジェットフェンカルブおよびその分解物の経時変化（フェニル標識体）

pH	処理後 時間 (日)	処理放射能に対する割合 (%)					物質収支
		有機抽出層 ¹⁴ C	ジェットフェ ンカルブ	DEA	その他	水層 ¹⁴ C	
3	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	101.2	100.3	-	0.9	0.3	101.5
	14	104.6	104.1	-	0.5	0.2	104.8
	21	105.6	105.2	-	0.4	0.2	105.8
	30	104.8	104.4	-	0.4	0.2	105.0
5	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	95.1	94.1	-	1.0	0.1	95.2
	14	87.6	87.0	-	0.6	0.1	87.7
	21	99.4	99.0	-	0.4	0.1	99.5
	30	95.1	94.6	-	0.5	0.1	95.2
7	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	97.5	96.6	-	0.9	0.2	97.7
	14	99.2	98.5	-	0.7	0.3	99.5
	21	98.8	98.4	-	0.4	0.3	99.1
	30	97.2	96.8	-	0.4	0.4	97.6
9	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	90.4	89.7	-	0.7	0.2	90.6
	14	102.4	102.0	-	0.4	0.2	102.6
	21	96.0	95.6	-	0.4	0.3	96.3
	30	100.1	99.7	-	0.4	0.3	100.4
11	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	97.2	95.9	-	1.3	0.1	97.3
	14	102.0	100.0	-	1.6	0.2	102.2
	21	97.0	94.9	-	1.8	0.2	97.2
	30	102.3	99.4	-	2.5	0.3	102.6

表3 60°C、pH 3、5、7、9、11 緩衝液中におけるジエトフェンカルブおよびその分解物の経時変化（フェニル標識体）

pH	処理後 時間 (日)	処理放射能に対する割合 (%)					物質収支
		有機抽出層 ¹⁴ C	ジエトフェ ンカルブ	DEA	その他	水層 ¹⁴ C	
3	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	90.7	89.8	-	0.9	0.5	91.2
	14	100.2	99.3	-	0.9	0.4	100.6
	21	97.8	97.4	-	0.4	0.3	98.1
	30	99.0	98.5	-	0.5	0.4	99.4
5	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	96.7	95.5	-	1.2	0.1	96.8
	14	97.2	96.7	-	0.5	0.2	97.4
	21	92.6	92.1	-	0.5	0.2	92.8
	30	102.4	101.8	-	0.6	0.2	102.6
7	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	100.3	99.1	-	1.2	0.5	100.8
	14	102.3	101.4	-	0.9	0.8	103.1
	21	100.9	100.2	-	0.7	0.9	101.8
	30	102.4	101.7	-	0.7	1.2	103.6
9	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	99.7	98.6	-	1.1	0.3	100.0
	14	99.8	98.7	0.2	0.9	0.4	100.2
	21	105.1	103.5	-	1.6	0.6	105.7
	30	110.5	108.5	-	2.0	0.9	111.4
11	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	102.4	82.2	3.8	16.4	1.4	103.8
	14	100.2	69.8	9.7	20.7	4.9	105.1
	21	97.5	58.5	10.1	28.9	6.1	103.6
	30	98.5	50.5	23.8	23.9*	10.0	108.5

* 8種の微量分解物から成る。

表4 25°C、pH 3、5、7、9、11 緩衝液中におけるジェットフェンカルブおよびその分解物の経時変化 (イソプロピル標識体)

pH	処理後 時間 (日)	処理放射能に対する割合 (%)					
		有機抽出層 ¹⁴ C	ジェットフェ ンカルブ	DEA	その他	水層 ¹⁴ C	物質収支
3	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	99.1	94.7	-	4.4	<0.1	99.1
	14	96.2	95.4	-	0.8	<0.1	96.2
	21	98.3	94.9	-	3.4	<0.1	98.3
	30	99.6	99.1	-	0.5	<0.1	99.6
5	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	99.8	97.5	-	2.3	<0.1	99.8
	14	101.0	100.3	-	0.7	<0.1	101.0
	21	99.6	95.6	-	4.0	<0.1	99.6
	30	100.3	99.8	-	0.5	<0.1	100.3
7	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	101.6	97.0	-	4.6	<0.1	101.6
	14	101.1	100.4	-	0.7	<0.1	101.1
	21	103.0	99.6	-	3.4	<0.1	103.0
	30	103.0	102.6	-	0.4	<0.1	103.0
9	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	102.4	101.2	-	1.2	0.1	102.5
	14	99.8	99.1	-	0.7	<0.1	99.8
	21	104.3	102.6	-	1.7	<0.1	104.3
	30	104.0	103.6	-	0.4	<0.1	104.0
11	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	99.9	99.1	-	0.8	0.1	100.0
	14	98.5	97.8	-	0.7	<0.1	98.5
	21	99.5	98.8	-	0.7	0.1	99.6
	30	100.4	100.0	-	0.4	0.1	100.5

表5 40℃、pH 3、5、7、9、11 緩衝液中におけるジエトフェンカルブおよびその分解物の経時変化 (イソプロピル標識体)

pH	処理後 時間 (日)	処理放射能に対する割合 (%)					物質収支
		有機抽出層 ¹⁴ C	ジエトフェ ンカルブ	DEA	その他	水層 ¹⁴ C	
3	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	96.7	95.8	-	0.9	<0.1	96.7
	14	96.9	96.3	-	0.6	<0.1	96.9
	21	96.5	95.3	-	1.2	<0.1	96.5
	30	98.1	97.7	-	0.4	<0.1	98.1
5	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	97.1	95.9	-	1.2	<0.1	97.1
	14	98.3	97.7	-	0.6	<0.1	98.3
	21	99.0	98.5	-	0.5	<0.1	99.0
	30	99.5	99.1	-	0.4	<0.1	99.5
7	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	100.4	99.3	-	1.1	<0.1	100.4
	14	97.5	97.1	-	0.4	<0.1	97.5
	21	98.9	98.4	-	0.5	<0.1	98.9
	30	99.2	98.8	-	0.4	<0.1	99.2
9	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	97.0	95.8	-	1.2	<0.1	97.0
	14	95.4	95.0	-	0.4	0.1	95.5
	21	96.1	95.5	-	0.6	<0.1	96.1
	30	97.3	97.0	-	0.3	<0.1	97.4
11	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	102.4	101.5	-	0.9	0.2	102.6
	14	103.8	103.4	-	0.4	0.3	104.1
	21	102.0	101.6	-	0.4	0.5	102.5
	30	101.6	101.2	-	0.4	0.6	102.2

表6 60°C、pH 3、5、7、9、11 緩衝液中におけるジエトフェンカルブおよびその分解物の経時変化 (イソプロピル標識体)

pH	処理後 時間 (日)	処理放射能に対する割合 (%)					物質収支
		有機抽出層 ¹⁴ C	ジエトフェ ンカルブ	DEA	その他	水層 ¹⁴ C	
3	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	100.0	98.2	-	1.8	<0.1	100.0
	14	98.2	97.7	-	0.5	<0.1	98.2
	21	101.5	100.7	-	0.8	0.1	101.6
	30	105.4	104.5	-	0.9	0.1	105.5
5	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	102.0	100.8	-	1.2	<0.1	102.0
	14	102.1	101.6	-	0.5	<0.1	102.1
	21	100.0	99.1	-	0.9	0.1	100.1
	30	101.2	100.4	-	0.8	0.1	101.3
7	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	100.1	99.1	-	1.0	<0.1	100.1
	14	97.9	97.4	-	0.5	<0.1	97.9
	21	101.0	100.3	-	0.7	0.1	101.1
	30	107.6	106.8	-	0.8	0.1	107.7
9	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	100.2	99.5	-	0.7	0.1	100.3
	14	100.2	99.7	-	0.5	0.2	100.4
	21	103.1	102.3	-	0.8	0.3	103.4
	30	102.6	101.8	-	0.8	0.5	103.1
11	0	100.0	100.0	-	<0.1	<0.1	100.0
	7	94.6	93.9	-	0.7	3.1	97.7
	14	90.1	89.4	-	0.7	5.8	95.9
	21	84.8	84.3	-	0.5	8.8	93.6
	30	82.7	82.0	-	0.7	9.0	91.7

図1 ジェトフェンカルブの加水分解経路

(2) ジェトフェンカルブの水中光分解動態試験

(資料 IV-2)

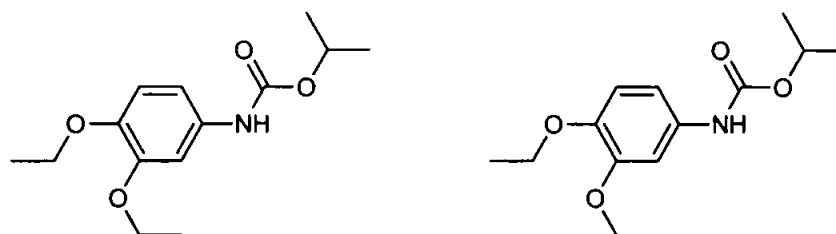
試験機関：Covance Laboratories Ltd

[GLP 対応]

報告書作成年：2006 年

供試化合物： [フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ
[イソプロピル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

化学構造：



*：標識位置

化学名：イソプロピル 3,4-ジエトキシカルバネート

	フェニル標識体	イソプロピル標識体
標識位置		
比放射能		
放射化学的純度		

供試水：

純水：オートクレーブ滅菌した HPLC グレード水を 0.2 μm の滅菌フィルターでろ過滅菌して使用。pH 範囲は 6.2~6.9。

自然水：英国 West Yorkshire 州 Chevin Forest Park の川から採取（採取年月日：2005 年 4 月 28 日）し、0.2 μm の滅菌フィルターでろ過滅菌して使用。pH 範囲は 7.4~8.0。

光源：キセノンランプ（Suntest CPS+、波長 290 nm 未満の光を遮断するフィルター付き）

光強度：約 1.4 MJ/m²/日 = 16.2 W/m²（波長範囲：300~400 nm）

東京（北緯 35 度、4~6 月）の自然太陽光の放射照度 0.672 MJ/m²/日（波長範

囲：300～400 nm) から、試験で使用したキセノンランプ光源人工光の1日間の照射は、上記自然太陽光のほぼ2日間の照射に相当する。

試験方法：フェニル標識体あるいはイソプロピル標識体のアセトニトリル溶液を各供試水に添加して混合し、ジエトフェンカルブの最終濃度が1 mg/Lとなるよう試験水を調製した。溶解助剤としてのアセトニトリル濃度は1%未満であった。

試験容器にはガラスバイアルを使用した。光照射区用には石英ガラス製の蓋をし、 $25\pm 2^\circ\text{C}$ で15日間、人工太陽光を照射した。暗対照区用にはPTFE加工したゴム製クリップキャップで密閉し、 $25\pm 2^\circ\text{C}$ の暗条件でインキュベートした。

光照射区のガラスバイアルはエチレングリコールおよび2M水酸化ナトリウム水溶液に接続し、揮発性有機物質および CO_2 の捕集を行った。イソプロピル標識体については、0.1M硫酸トラップも用いた。イソプロピル標識体については光照射4、11および15日後に、フェニル標識体については15日後に、LSCを用いて捕集した $^{14}\text{CO}_2$ を定量した。さらに、イソプロピル標識体については、光照射後4～11日の間に捕集されたイソプロピルアルコールをHPLCおよびGC-MSを用いて測定した。

ジエトフェンカルブおよび分解物の同定・定量は、光照射1、4、7、10 (イソプロピル標識体については11日)、13、および15日後に試料を採取し、HPLCを用いた標品とのクロマトグラフィーにより行い、2次元TLCあるいはGC-MSにより確認した。

ジエトフェンカルブの分解速度定数および半減期は、一次速度式を用いて算出した。

試験結果：

^{14}C 分布：各試験水中のジエトフェンカルブおよび分解物の経時変化を表1～4に示した。試験期間中の全試料の物質収支は、処理放射能の93.6～102.7%の範囲であった。フェニル標識体およびイソプロピル標識体は、純水中でそれぞれ光照射15日後に87.8%および88.6%まで減少した。自然水中では、それぞれ15日後に44.4%および34.7%まで減少した。

分解：光照射による主要分解物は、イソプロピル標識体ではN-phenyl結合の開裂およびカルバモイル基の脱離によって生成したイソプロピルカーバメート (IPC) 並びにイソプロピルアルコール (IPA) であり、フェニル標識体では $^{14}\text{CO}_2$ であった。自然水中およびトラップ中において検出されたIPAは、光照射13日後に最高で処理放射能の31.7%に達した後、15日後には28.4%となった。IPCは経時的に増加し、光照射15日後には最高で処理放射能の16.9%に達した。両分解物とも純水中での生成量は試験期間を通じて5%未満と微量であった。 $^{14}\text{CO}_2$ の発生量は、

フェニル標識体の自然水光照射区において 13 日後に最高で処理放射能の 20.1% に達したが、純水中では最高でも 2.1% と微量であった。イソプロピル標識体からは $^{14}\text{CO}_2$ の発生は認められなかった。 $^{14}\text{CO}_2$ はフェニル環の開裂により生ずると考えられた。

その他の分解物として、フェニル標識体では自然水光照射区に HPLC クロマトグラム上に分析用標品と一致しない 4 種の未同定ピークが検出されたが、それらの生成量は最大でも処理放射能の 7.3% (15 日後) であった。さらに、クロマトグラム上での分離が不十分な帯状に拡散した放射能領域が認められたが、いずれも処理放射能の 3% (15 日後) を超えるものではなかった。この帯状に拡散した放射能領域には、ジエトフェンカルブの N-phenyl 結合の開裂によって生成するアニリン (DEA) やフェノール誘導体の重合体が含まれると考えられた。イソプロピル標識体では、自然水光照射区において 1 種の未同定分解物が検出されたが、その生成量は最高でも処理放射能の 7.2% (13 日後) であった。

ジエトフェンカルブの水中における予想光分解経路を図 1 に示した。

推定半減期：ジエトフェンカルブは光照射により純水および自然水中で分解が促進され、さらにその分解は純水中よりも自然水中においてより速やかに進行した。下表にジエトフェンカルブの各試験区での推定半減期を示した。

供試水	供試化合物	光照射区		暗対照区
		人工太陽光	自然太陽光 ^a	
純水	フェニル標識体	122 日 ^b ($r^2 = 0.775$) ^e	262 日 ^c	安定 ^d
	イソプロピル標識体	121 日 ^b ($r^2 = 0.708$)	256 日 ^c	安定 ^d
自然水	フェニル標識体	10.6 日 ($r^2 = 0.967$)	22.7 日	安定 ^d
	イソプロピル標識体	10.1 日 ($r^2 = 0.978$)	21.3 日	安定 ^d

a: 東京 (北緯 35 度)、春 (4~6 月) の自然太陽光換算値

b: 外挿値

c: 外挿値から算出

d: 暗所対照区では分解が遅く、半減期は算出できなかった。

e: r^2 は相関係数を示す。

表1 純水中におけるジエトフェンカルブおよびその分解物の経時変化（フェニル標識体）

試験区	処理後 日数 (日)	処理放射能に対する割合 (%)						
		試験水				容器洗浄液	揮発性物質 ^c	物質収支
		合計値	親化合物	未同定化合物 ^a	バックグ ラウンド ^b			
光照射区	0	99.0	96.6	1.5 (0.7)	0.9	0.3	NA	99.3
	1	97.8	93.7	2.5 (1.1)	1.7	0.3	0.2	98.3
	4	101.4	97.3	2.4 (0.7)	1.8	0.4	0.2	102.0
	7	98.7	93.6	3.9 (0.8)	1.3	0.5	ND	99.2
	10	98.5	92.4	4.5 (1.3)	1.6	0.3	0.8	99.6
	13	94.6	89.3	3.6 (1.0)	1.8	0.5	1.1	96.2
	15	95.1	87.8	6.5 (1.5)	0.8	0.4	2.1	97.6
暗対照区	1	101.9	98.7	1.4 (0.7)	1.8	0.4	NA	102.3
	4	99.5	97.2	1.8 (0.5)	0.5	0.6	NA	100.1
	7	102.0	99.9	1.9 (0.6)	0.2	0.7	NA	102.7
	10	100.8	98.1	1.8 (1.0)	0.9	0.4	NA	101.2
	13	100.8	97.2	1.9 (0.8)	1.8	0.5	NA	101.3
	15	100.9	98.7	0.5 (0.5)	1.7	0.3	NA	101.2

ND：検出されず、NA：分析に供せず

a：括弧内の数値は未同定化合物のうちの最大値を示す。

b：その他の主要ピークのない分離不能な放射能画分。

c：水酸化ナトリウムトラップのみで検出され、その成分は二酸化炭素であった。

表2 自然水中におけるジェットフェンカルブおよびその分解物の経時変化（フェニル標識体）

試験区	処理後 日数 (日)	処理放射能に対する割合 (%)						
		試験水				容器洗浄液	揮発性物質 ^c	物質収支
		合計値	親化合物	未同定化合物 ^a	バックグ ラウンド ^b			
光照射区	0	100.8	98.4	1.7 (0.7)	0.6	0.2	NA	101.0
	1	98.4	89.4	7.7 (1.2)	1.2	0.3	0.1	98.8
	4	91.6	73.5	16.7 (2.5)	1.4	0.5	3.0	95.1
	7	86.2	58.7	26.7 (4.5)	0.8	0.2	9.1	95.5
	10	81.0	48.9	31.2 (5.7)	1.0	0.3	15.0	96.3
	13	73.3	35.6	37.1 (5.5)	0.6	0.2	20.1	93.6
	15	77.6	44.4	31.6 (7.3)	1.6	0.2	16.2	94.0
暗対照区	1	99.1	96.4	1.2 (0.8)	1.5	0.5	NA	99.6
	4	99.5	97.9	1.1 (0.7)	0.5	0.6	NA	100.1
	7	99.2	96.6	1.4 (0.6)	1.1	0.4	NA	99.6
	10	101.4	99.7	0.8 (0.8)	0.9	0.5	NA	101.9
	13	98.2	95.8	0.8 (0.6)	1.6	0.5	NA	98.7
	15	99.0	97.7	0.7 (0.7)	0.6	0.5	NA	99.5

NA：分析に供せず

a：括弧内の数値は未同定化合物のうちの最大値を示す。

b：その他の主要ピークのない分離不能な放射能画分。

c：水酸化ナトリウムトラップのみで検出され、その成分は二酸化炭素であった。

表3 純水中におけるジェットフェンカルブおよびその分解物の経時変化（イソプロピル標識体）

試験区	処理後 日数 (日)	処理放射能に対する割合 (%)								
		試験水						容器 洗浄液	揮発性物質 ^c	物質収支
		合計値	親化合物	IPA	IPC	未同定化合物 ^a	バックグ ラウンド ^b			
光照射区	0	99.2	99.1	ND	ND	ND (NA)	0.1	0.1	NA	99.3
	1	98.5	98.2	ND	ND	0.3 (0.3)	ND	0.2	0.1	98.8
	4	99.9	98.2	0.9	ND	0.5 (0.5)	0.4	0.3	0.6	100.8
	7	97.4	92.8	ND	ND	2.7 (1.2)	1.9	0.3	0.6	98.3
	11	99.0	93.0	1.3	1.2	2.4 (1.5)	1.0	0.5	1.3	100.8
	13	100.1	95.5	1.0	1.2	1.7 (1.0)	0.8	0.4	1.3	101.8
	15	96.1	88.6	1.8	2.3	2.1 (1.0)	1.2	0.4	2.7	99.2
暗対照区	1	100.2	99.4	ND	ND	ND (NA)	0.8	0.2	NA	100.4
	4	99.2	98.8	ND	ND	ND (NA)	0.4	0.2	NA	99.4
	7	100.4	99.5	ND	ND	ND (NA)	0.9	0.1	NA	100.5
	11	101.7	101.2	ND	ND	ND (NA)	0.5	0.4	NA	102.1
	13	99.3	97.2	ND	ND	0.5 (0.5)	1.6	0.2	NA	99.5
	15	100.1	99.1	ND	ND	ND (NA)	1.0	0.3	NA	100.4

ND：検出されず、NA：分析に供せず

IPA：イソプロピルアルコール、IPC：イソプロピルカーバメート

a：括弧内の数値は未同定化合物のうちの最大値を示す。

b：その他の主要ピークのない分離不能な放射能画分。

c：全種類のトラップに放射能が分布しており、自然水試料の同定に基づき IPA と考えられた。二酸化炭素は検出されなかった。

表4 自然水中におけるジェットフェンカルブおよびその分解物の経時変化（イソプロピル標識体）

試験区	処理後 日数 (日)	処理放射能に対する割合 (%)									
		試験水						容器 洗浄液	揮発性物質 ^c		物質収支
		合計値	親化合物	IPA	IPC	未同定化合物 ^a	バックグ ラウンド ^b		IPA	その他	
照射区	0	100.5	99.9	ND	ND	ND (NA)	0.6	0.2	NA	NA	100.7
	1	97.1	91.7	3.0	1.3	0.5 (0.5)	0.7	0.3	0.5	ND	97.9
	4	96.4	79.4	7.5	5.8	2.6 (2.3)	1.2	0.3	1.2	ND	97.9
	7	88.9	60.3	10.2	10.0	7.3 (4.3)	1.2	0.7	8.5	0.2	98.3
	11	87.9	53.4	10.7	11.7	10.3 (4.9)	1.8	0.2	10.5	0.7	99.3
	13	78.7	35.4	14.4	13.1	14.7 (7.2)	1.2	0.1	17.3	0.9	97.0
	15	76.1	34.7	10.0	16.9	13.2 (6.9)	1.3	0.2	18.4	1.0	95.7
暗対照区	1	99.9	99.3	ND	ND	ND (NA)	0.6	0.2	NA	NA	100.1
	4	101.1	100.1	ND	ND	ND (NA)	1.0	0.3	NA	NA	101.4
	7	100.4	99.0	ND	ND	ND (NA)	1.4	0.3	NA	NA	100.7
	11	101.7	101.2	ND	ND	ND (NA)	0.5	0.3	NA	NA	102.0
	13	100.2	99.2	ND	ND	ND (NA)	1.0	0.2	NA	NA	100.4
	15	99.5	98.4	ND	ND	0.6 (0.4)	0.4	0.4	NA	NA	99.9

ND：検出されず、NA：分析に供せず

IPA：イソプロピルアルコール、IPC：イソプロピルカーバメート

a：括弧内の数値は未同定化合物のうちの最大値を示す。

b：その他の主要ピークのない分離不能放射能画分。

c：全種類のトラップに放射能が分布しており、水酸化ナトリウムおよび硫酸トラップに捕集された放射能はIPAと同定された。二酸化炭素は検出されなかった。

図1 ジェトフェンカルブの水中における推定光分解経路

5. 土壌吸着性に関する試験

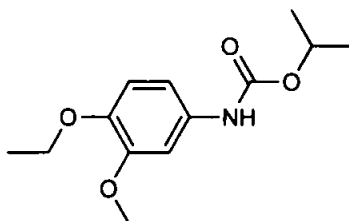
(1) ジェトフェンカルブの土壌吸着試験

(資料 V-1)

試験機関：(株)化学分析コンサルタント

報告書作成年：1994年(2001年改訂)

供試化合物：ジェトフェンカルブ(非標識化合物)



化学名：イソブチル 3,4-ジエトキシカルバネレート

純度：

供試土壌：下記の4種類の畑地土壌を用いた。

土壌 No.	No. 11	No. 14	No. 16	No. 20
採取場所	道立十勝農試 植調試験地 河西郡芽室町	日植防研 牛久圃場 牛久市結束町	和歌山県 農業試験場 那賀郡貴志川町	日植防研 宮崎試験場 宮崎郡佐土原町
土壌群名	淡色黒ぼく土	褐色火山灰土壌	洪積埴壤土	砂丘未熟土
土性分類	埴壤土	シルト質埴壤土	軽埴土	砂土
pH (H ₂ O)	6.2	6.8	5.2	5.8
pH (KCl)	5.8	6.9	3.7	6.3
砂 (%)	57.1	26.2	41.7	87.1
シルト (%)	21.5	50.9	29.4	5.7
粘土 (%)	21.4	22.9	28.9	7.2
有機炭素含有率 (%)	2.56	4.19	1.33	1.56
陽イオン交換容量 (me/100 g)	11.7	21.4	11.0	7.0
リン酸吸収係数	1330	2000	410	660
粘土鉱物の種類	アロフェン、 パーミキュライト	アロフェン、 パーミキュライト	カオリン鉱物、 パーミキュライト	ハロイサイト

試験方法：OECD ガイドライン 106（吸着／脱着）に準拠した。

4 種類の畑地土壌におけるジエトフェンカルブの土壌吸着を検討した。

土壌の調整；各土壌とも風乾細土とした。各土壌試料（乾土 5 g 相当）を遠心管に入れ、
純水 5 mL を加えた後一夜放置した（土壌：水スラリー）。

予備試験：

試験溶液の作成；ジエトフェンカルブの一定量を 0.01 M 塩化カルシウム溶液に溶解して、
4.22 µg/mL 溶液を調製した。

土壌スラリー調製；各土壌：水スラリーに試験溶液を 20 mL 加えた。

吸着平衡化時間の測定；各遠沈管を密栓後、遮光条件下の恒温槽内（25℃）で 4、6、8、
16 および 24 時間連続振盪した。各設定時間終了時に試料を遠心分離し、上清
15 mL をジクロロメタン抽出した後、ガスクロマトグラフィー（NPD）で定量し
て水相濃度を求めた。同時にコントロール試料（土壌なし）についても実施し
た。その結果、6～24 時間のいずれの振盪時間においても変化率が 10%以下であ
り、平衡状態が保たれていた（表 1）。回収率は、96.8～99.4%であった（表 2）。
得られた結果に基づき、平衡化時間を 24 時間とした。

表 1 25℃でインキュベートした土壌試料の水相中のジエトフェンカルブ残存率 (%)

平衡化時間 (時間) 試料 No.	4	6	8	16	24
No. 11	77.2	76.8	73.6	68.8	68.4
No. 14	57.7	58.1	52.6	50.8	49.4
No. 16	82.3	80.8	84.9	84.1	76.4
No. 20	91.4	90.8	91.2	90.8	91.2

初期添加量：84.40 µg
数値は 2 連の平均値

表 2 平衡化試験におけるコントロール試験の回収率

平衡化時間 (時間) 試料 No.	4	6	8	16	24
コントロール (土壌なし)	97.4	96.8	97.7	96.8	99.4

初期添加量：84.40 µg
数値は 2 連の平均値

本試験：

試験溶液の作成；ジエトフェンカルブの一定量を 0.01 M 塩化カルシウム溶液に溶解して、0.958 および 4.80 $\mu\text{g}/\text{mL}$ の試験溶液を調製した。更にこの試験溶液を 0.01 M 塩化カルシウム溶液で希釈して 0.0479 および 0.479 $\mu\text{g}/\text{mL}$ の希釈試験溶液を調製することにより、4 濃度の試験溶液を準備した。

土壌スラリー調製；各土壌：水スラリーに試験溶液をそれぞれ 20 mL 加えた。

吸着操作；各遠沈管を密栓後、遮光条件下の恒温槽内（25℃）で 24 時間連続振盪した。振盪終了後、試料を遠心分離し、上清 15 mL を分析に供した。

分析方法；上清中のジエトフェンカルブ量は、ジクロロメタンで抽出し、フロリジルカラムクロマトグラフィーで精製した後、ガスクロマトグラフィー（NPD）で測定した。土壌中のジエトフェンカルブ量（4.80 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 試験溶液添加試料のみ）は、メタノール抽出、ジクロロメタン転溶後、フロリジルカラムクロマトグラフィーで精製し、ガスクロマトグラフィー（NPD）で測定した（図 1）。

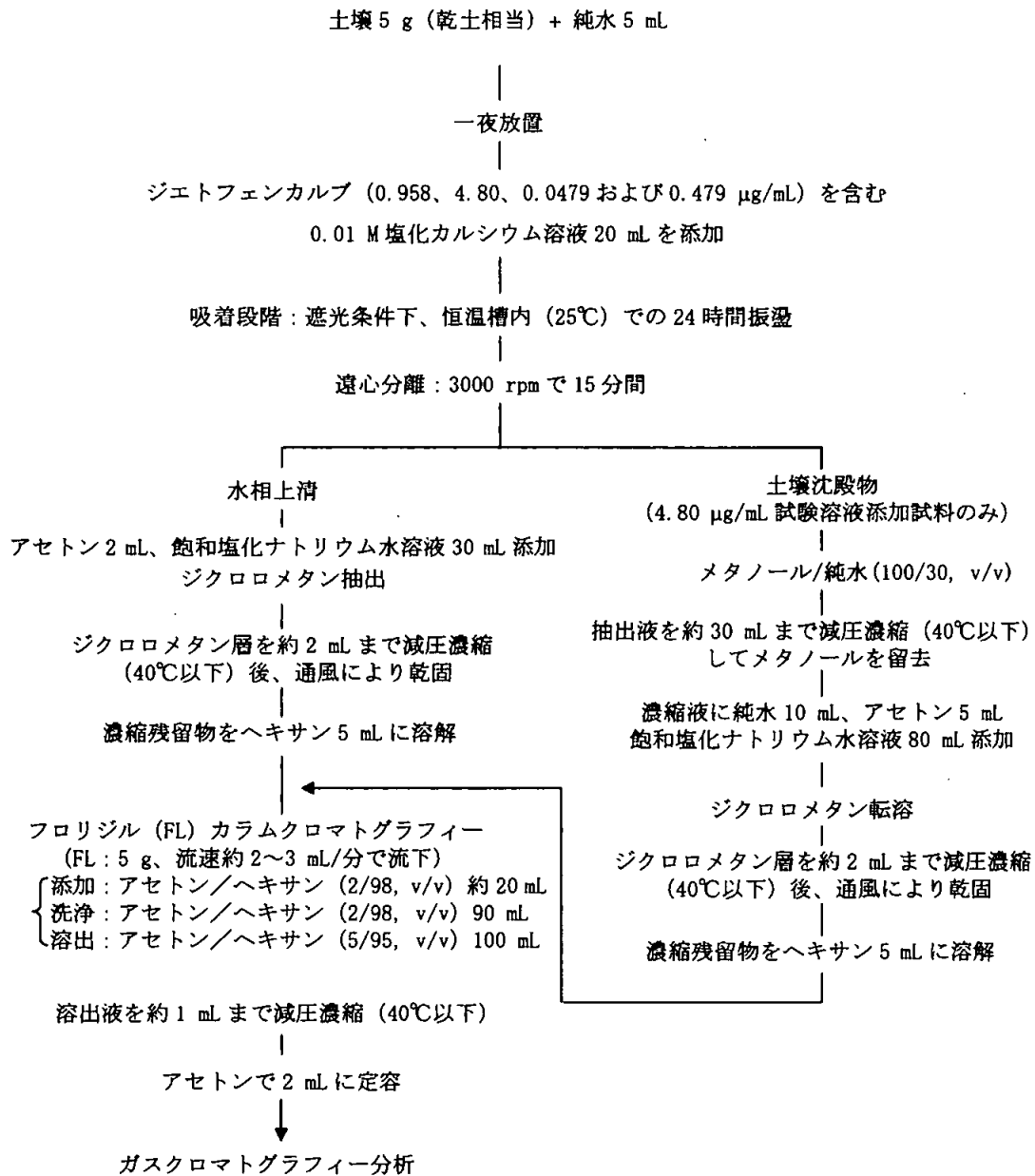


図1 吸着測定のプロースキーム

結 果:

添加回収率およびブランク試験; 各試験土壌 5 g に 10 µg 添加して添加回収試験を実施した結果、平均回収率は、92.0~97.6%であった (表 3)。なお、各試験土壌の水相および土壌沈殿物のブランク試験の結果は、全て検出限界未満であった (表 3)。

表3 分析操作における添加回収率とブランク値

試料 No.	回収率 (%)	ブランク値	
		水相 (μg/mL)	土壌相 (μg/g)
No. 11	97.6	<0.007	<0.02
No. 14	92.0	<0.007	<0.02
No. 16	94.6	<0.007	<0.02
No. 20	94.2	<0.007	<0.02

数値は2連の平均値

物質収支；4.80 μg/mL 試験溶液添加試料を用いて物質収支を求めた結果、各土壌における平均物質収支は添加量の85.2～89.8%であった（表4）。

表4 物質収支

土壌 No.	水相中 (μg)	土壌相中 (μg)	物質収支 (%)
No. 11	62.2	24.05	89.8
No. 14	43.75	38.45	85.6
No. 16	70.3	12.55	86.3
No. 20	75.85	6.00	85.2

初期添加量：96.0 μg

数値は2連の平均値

土壌吸着；ジェットフェンカルブの土壌吸着はFreundlichの吸着等温式によく適合し、 K_{ads_F} oc は87.2～177の範囲であり、McCall等の土壌移動性分類によると、“high”または“medium”に分類された。吸着試験結果を表5に示した。

表5 吸着試験結果

土壌 No.	1/n ¹⁾	K_{ads_F} ¹⁾	r ¹⁾	OC% ²⁾	$K_{ads_F\ oc}$ ³⁾
No. 11	0.833	3.09	0.998	2.56	121
No. 14	0.792	7.41	0.999	4.19	177
No. 16	0.900	2.01	0.999	1.33	151
No. 20	1.02	1.36	0.997	1.56	87.2

1) Freundlichの吸着等温式による定数項と相関係数

2) 土壌中の有機炭素含有率

3) K_{ads_F} 値を各土壌のOC%で割り求めた有機炭素吸着係数

6. 分解要因

(1) ジェトフェンカルブの土壌表面光分解試験

(資料 VI-1)

試験機関：PTRL West, Inc.

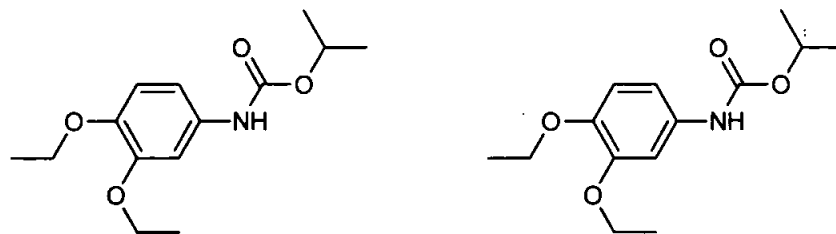
[GLP 対応]

報告書作成年：2003 年

供試標識化合物： [フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

[イソプロピル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

構造式：



*：標識位置

化学名：イソプロピル-3,4-ジエトキシカルバネート

	フェニル標識体	イソプロピル標識体
標識位置		
比放射能		
放射化学的純度		

供試土壌：以下ドイツ標準土壌を使用した。

採取場所	ドイツ/Rheinland-Pfaltz
土性 ¹⁾	埴土(Clay)
粒径分布 ¹⁾	
<0.002 mm	41.0
0.002~0.05	36.3
0.05~2.0	22.8
有機炭素含量 (%)	2.0
pH (0.01 M CaCl ₂)	6.8
陽イオン交換容量 (mval/100 g)	18
容水量 (g/100 g)	43
容積重 (g/100 mL)	1233
バイオマス (mg CO ₂ /100 g)	44.5

1) USDA 分類に従った。

光源： キセノンランプ (Heraeus Suntest CPS+、波長 290 nm 未満の光を遮断するフィルター付き)

光強度： 551 W/m² (波長範囲 300~800 nm)
試験で使用したキセノンランプ光源人工光の 8.3 時間の光照射は、北緯 40 度、夏季における自然太陽光 (4560 Wh/m²/日) の 1 日間の照射に相当する。

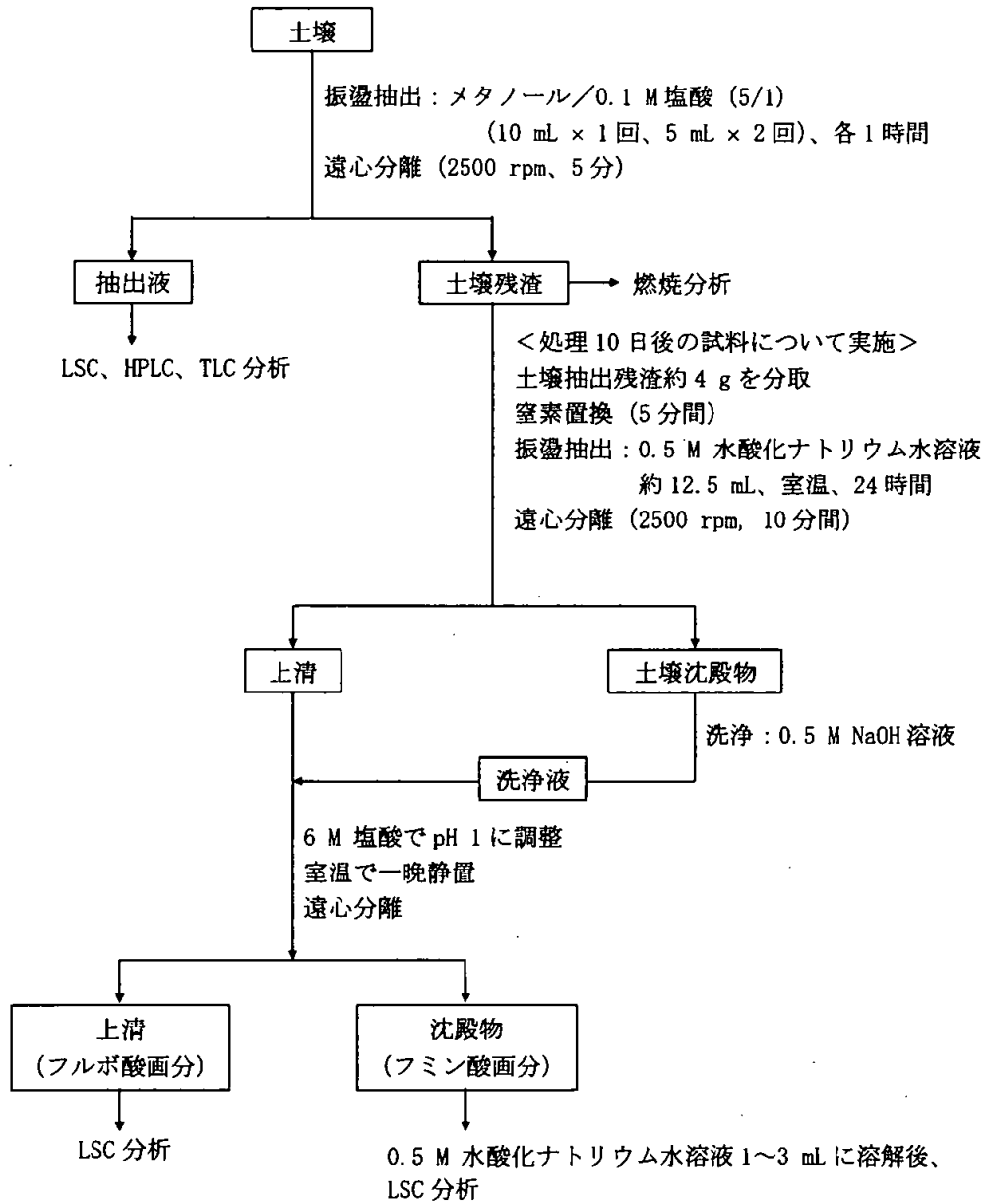
試験方法： 乾土 3.1 g 相当の土壌を石英容器に入れ、脱イオン水 (1~3 mL) を添加し、スラリーとした後、風乾して水分含量を最大容水量の 40% になるよう土壌薄層を調製した。濃度約 150-160 mg/L のジエトフェンカルブ各標識体のアセトニトリル溶液 100 μ L をガラス製シリンジを用いて設定濃度が約 0.5 μ g/g (乾土換算) となるように土壌薄層の表面に均一に処理した後、容器を 20 \pm 1 $^{\circ}$ C に設定したウォーターバスに入れて、キセノンランプ光を明暗周期 12 時間で 10 日間照射した。パイレックス容器を用いて同様に調製した暗対照区用土壌薄層試料は、容器を着色フィルムで覆って 20 \pm 1 $^{\circ}$ C に設定したインキュベーター内に入れ、照射区と同じ期間、暗条件下で静置した。試験期間中、土壌の水分含量は最大容水量の 40~50% になるように調整した。また、試験期間中に生成した揮発成分を捕集するために、脱イオン水を通した加湿空気を土壌試料上に通気し、二酸化炭素を 2 個の 10% KOH 溶液で、揮発性有機物質をエチレングリコールトラップで捕集した。さらに揮発性有機物質の捕集のために、フェニル標識体処理では活性炭トラップ、イソプロピル標識体処理では DNP (2, 4-ジフェニルヒドラジン誘導体で被覆したシリカ樹脂) トラップを設置した。
試料は以下の時点の明周期の終わりに 2 連で採取した。

試料採取時点

フェニル標識体： 処理直後、11 時間、1、2、4、7 および 10 日後
イソプロピル標識体： 処理直後、0.5、1、2、4、7 および 10 日後

採取した試料は次頁のスキームに従って分析し、ジエトフェンカルブおよびその代謝分解物を HPLC および TLC コクロマトグラフィーにより同定・定量した。さらに、一部の土壌残渣については次頁のスキームに従い、アルカリ分画による土壌残渣の化学的特徴付けを行った。

10% KOH およびエチレングリコールトラップ中の放射能は直接 LSC 分析により測定し、活性炭トラップは分析しなかった。DNP トラップはアセトニトリルで振盪抽出後、LSC により放射能の測定を行った。



土壌残渣中の放射エネルギーからフルボ酸画分およびフミン酸画分の放射エネルギーを差し引いたものをヒューミン画分の放射エネルギーとした。

ジエトフェンカルブの半減期は、一次速度式を用いて算出した。

試験結果：

^{14}C 分布：フェニル標識体およびイソプロピル標識体を土壌表面に処理し照射した試料における放射能分布の経時変化を暗所対照区とともにそれぞれ表 1 および 2 に示した。

試験期間中の物質収支は、処理放射能の 91.3~101.7%の範囲であった。また、試験終了時における抽出液、 CO_2 および土壌残渣中の放射能は、照射区ではそれぞれ処理量の 36.4~40.8%、15.3~16.9%および 34.0~39.2%であり、暗対照区ではそれぞれ 49.5~67.2%、2.0~17.9%および 24.6~27.9%であった。揮発性有機物質の生成は試験期間を通して照射区が 4.1%以下、暗対照区が 1.6%以下と微量であった。

代謝分解：ジエトフェンカルブは照射により土壌表面上で速やかに分解し、照射 10 日後において処理放射能の 12.0~12.8%まで減少した。一方、暗対照区ではジエトフェンカルブは処理 10 日後に 40.0~56.2%残存した。

主要代謝分解物は 6- NO_2 -DFC および 4-OH-DFC であった。6- NO_2 -DFC は照射区において、フェニル標識体およびイソプロピル標識体でそれぞれ処理放射能の最大 18.0% (10 日後) および 28.9% (7 日後) 生成し、暗対照区ではそれぞれ最大 2.2% (10 日後) および 15.7% (0.5 日後) 生成した。4-OH-DFC は照射区においてフェニル標識体およびイソプロピル標識体でそれぞれ最大 9.8% (11 時間後) および 4.4% (0.5 日後) 生成し、暗対照区ではそれぞれ最大 7.0% (処理直後) および 4.1% (4 日後) 認められた。その他、構造未同定の複数の代謝分解物が認められたが、試験期間中の生成量はいずれも 5%未満と微量であった。

土壌残渣についてアルカリ分画を行った結果、いずれもヒューミン画分に最も多く放射能が存在し (照射区 ; 19.0~22.5%、暗対照区 ; 13.8~16.2%)、次いでフルボ酸 (照射区 ; 13.0~13.7%、暗対照区 ; 8.5~9.4%) で、フミン酸に分布した放射能は微量 (3.3%以下) であった。

表1 土壌表面光分解試験における¹⁴C分布の経時変化(フェニル標識体)

試料採取時点	処理放射能に対する割合 (%)						
	0時間	11時間	1日	2日	4日	7日	10日
光照射区							
土壌抽出 ¹⁴ C ^a	98.7	84.9	77.5	71.3	61.6	45.4	36.4
ジエトフェンカルブ	90.5	66.2	61.2	52.9	46.5	18.7	12.0
6-NO ₂ -DFC	0.3	5.0	4.4	12.2	11.7	15.7	18.0
4-OH-DFC	7.0	9.8	3.9	2.2	0.7	0.7	0.9
未同定代謝物1	ND	ND	ND	ND	ND	2.9	2.0
未同定代謝物2	0.9	2.3	3.1	2.6	1.1	3.9	1.5
その他	ND	1.7	5.0	1.4	1.8	3.7	2.1
土壌残渣 ¹⁴ C	3.1	11.1	15.4	20.1	29.6	37.0	39.2
フルボ酸 ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	13.7
フミン酸 ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	3.1
ヒューミン ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	22.5
揮発性物質用トラップ							
KOH (CO ₂)	NA	0.4	1.6	3.4	3.0	11.3	16.9
エチレングリコール	NA	ND	ND	ND	ND	ND	ND
活性炭	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
物質収支	101.7	96.3	94.5	94.6	94.3	93.6	92.5
暗所対照区							
土壌抽出 ¹⁴ C液 ^a	98.7	89.7	88.8	87.6	79.0	70.3	67.2
ジエトフェンカルブ	90.5	81.0	80.9	82.8	70.3	60.7	56.2
6-NO ₂ -DFC	0.3	1.4	0.1	0.9	1.9	2.1	2.2
4-OH-DFC	7.0	4.8	3.0	3.0	5.7	ND	5.3
未同定代謝物1	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND
未同定代謝物2	0.9	1.4	1.8	0.7	0.5	4.6	1.3
その他	ND	1.2	3.1	0.3	0.7	2.9	2.2
土壌残渣 ¹⁴ C	3.1	6.0	7.3	10.5	17.0	24.6	27.9
フルボ酸 ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	8.5
フミン酸 ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	3.3
ヒューミン ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	16.2
揮発性物質用トラップ							
KOH (CO ₂)	NA	ND	0.2	0.5	1.0	1.8	2.0
エチレングリコール	NA	ND	ND	ND	ND	ND	ND
活性炭	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
物質収支	101.7	95.7	96.2	98.5	96.9	96.6	97.0

ND: 検出されず、NA: 分析に供せず 数値は2連の平均値

a: 土壌抽出液および土壌残渣画分の数値は申請者が計算。

表 2 土壌表面光分解試験における ¹⁴C 分布の経時変化 (インプロピル標識体)

試料採取時点	処理放射能に対する割合 (%)						
	0 時間	0.5 日	1 日	2 日	4 日	7 日	10 日
光照射区							
土壌抽出 ¹⁴ C ^a	93.7	85.1	79.9	72.2	62.2	58.5	40.8
ジエトフェンカルブ	88.7	59.8	46.5	37.8	36.3	19.9	12.8
6-NO ₂ -DFC	0.3	16.7	25.5	22.5	16.1	28.9	21.9
4-OH-DFC	2.6	4.4	1.6	2.3	1.7	1.7	ND
未同定代謝物 1	0.5	1.0	2.6	4.3	3.7	3.2	1.7
未同定代謝物 2	1.1	1.7	2.5	3.7	2.2	1.8	ND
その他	0.7	1.6	1.5	1.7	2.3	3.3	4.4
土壌残渣 ¹⁴ C	2.7	7.7	10.2	17.2	26.9	26.9 ^b	34.0
フルボ酸 ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	13.0
フミン酸 ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	2.1
ヒューミン ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	19.0
揮発性物質用トラップ							
KOH (CO ₂)	NA	0.8	2.8	4.6	8.1	9.6	15.3
エチレングリコール ^a	NA	0.2	0.3	3.8	0.4	0.2	0.6
DNPH ^a	NA	0.1	0.1	0.3	0.3	1.3	0.8
物質収支	96.4	93.8	93.2	98.0	97.7	96.6 ^b	91.3
暗所対照区							
土壌抽出 ¹⁴ C ^a	93.7	91.5	87.9	85.8	78.3	59.0	49.5
ジエトフェンカルブ	88.7	66.8	81.0	80.8	70.1	49.0	40.0
6-NO ₂ -DFC	0.3	15.7	1.0	0.4	2.1	3.9	4.3
4-OH-DFC	2.6	3.0	1.0	2.9	4.1	2.8	1.2
未同定代謝物 1	0.5	0.7	0.6	0.7	0.8	0.7	ND
未同定代謝物 2	1.1	1.0	0.5	0.5	0.5	0.8	0.3
その他	0.7	4.3	3.9	0.7	0.8	1.9	3.8
土壌残渣 ¹⁴ C	2.7	4.8	5.3	7.5	10.6	20.9 ^b	24.6
フルボ酸 ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	9.4
フミン酸 ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	1.5
ヒューミン ^a	NA	NA	NA	NA	NA	NA	13.8
揮発性物質用トラップ							
KOH (CO ₂)	NA	0.1	1.7	2.7	6.6	13.8	17.9
エチレングリコール ^a	NA	ND	0.2	1.2	0.5	0.1	0.2
DNPH ^a	NA	0.1	0.1	0.4	0.4	0.4	0.8
物質収支	96.4	96.3	95.0	97.5	96.4	94.1 ^b	92.9

ND : 検出されず、NA : 分析に供せず^a 数値は 2 連の平均値

a : 土壌抽出液、土壌残渣画分、エチレングリコールおよび DNPH の数値は申請者が計算。

b : 報告書中の分解物分布表 (Table VIII) の数値に転記誤りがあったため、物質収支表 (Table VI) 並びに Raw Data (Appendix K) から申請者が計算。

推定半減期：光照射区および暗対照区におけるジエトフェンカルブの消失半減期を下表に示した。ジエトフェンカルブは、光照射区において暗対照区よりも速やかに分解し、半減期は光照射区で3.6～4.1日、暗対照区で9.5～15日であった。本試験系で使用したキセノンランプ光8.3時間の光照射が、代表的な北緯40度における自然太陽光の1日間（24時間）の照射に相当し、試験系では明暗周期12時間で光照射していることから、自然太陽光下（北緯40度、夏季）におけるジエトフェンカルブの半減期は5.2～5.9日と推算された。

供試化合物	光照射区 (試験系)	自然太陽光（北緯40度、夏季） 換算値	暗所対照区
フェニル標識体	3.6日 ($r^2 = 0.9712$) ^a	5.2日	15日 ($r^2 = 0.9559$)
イソプロピル標識体	4.1日 ($r^2 = 0.9307$)	5.9日	9.5日 ($r^2 = 0.8730$)

a : r^2 は相関係数を示す。

推定光分解経路：ジエトフェンカルブの土壤表面上における予想光分解経路を図1に示した。ジエトフェンカルブの土壤表面上における主要分解経路は、フェニル環6位のニトロ化およびフェニル環4位のO-脱エチル化であった。生成した分解物はさらに代謝分解を受け、最終的に土壤残渣となるか、または二酸化炭素にまで無機化されると考えられた。

図1 ジェトフェンカルブの土壌表面における推定光分解経路

7. 土壌溶脱性に関する試験（土壌カラム移行性）

(1) ジェトフェンカルブの土壌リーチング試験

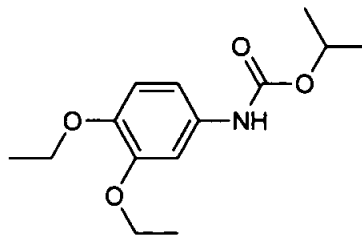
(資料 VII-1)

試験機関：住友化学工業株式会社

報告書作成年：1988年

供試標識化合物：[フェニル-¹⁴C]ジェトフェンカルブ

化学構造：



*：標識位置

化学名：イソプロピル 3,4-ジエトキシカルバネート

比放射能：

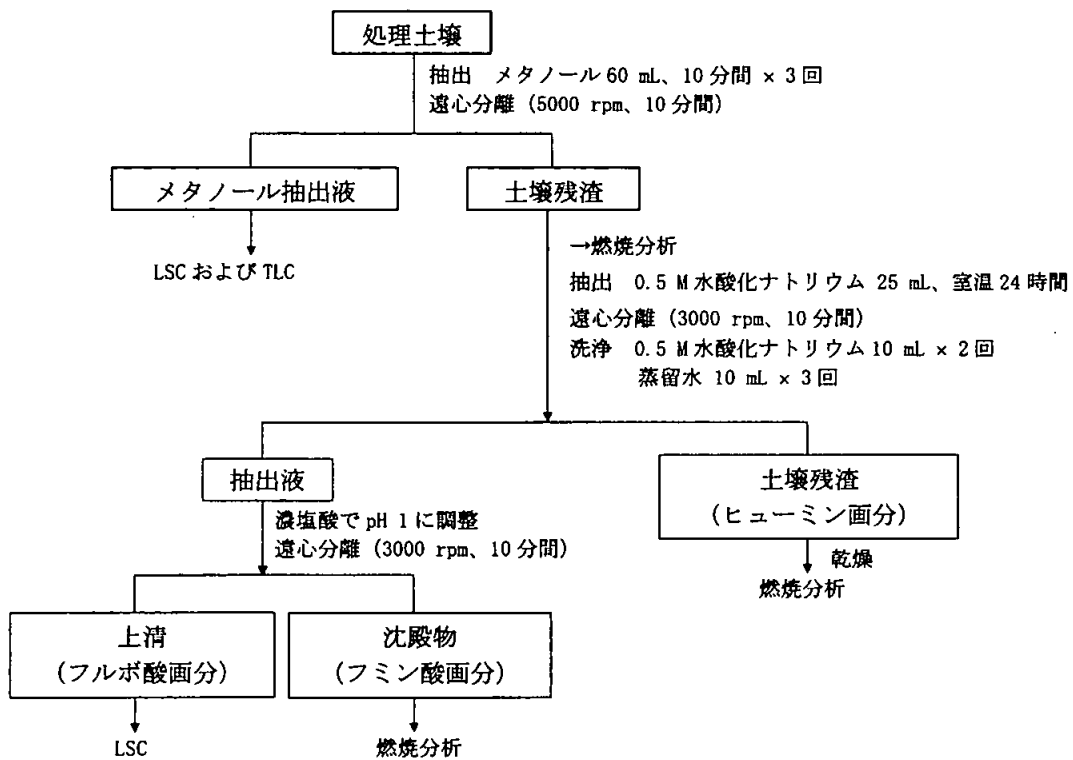
放射化学的純度：

供試土壌：下記の特性を有する4種類の土壌を使用した。

土壌名	牛久土壌	札幌土壌	安土土壌	武庫土壌
採取場所	茨城県牛久市	北海道札幌市	滋賀県蒲生郡 安土町	兵庫県武庫川
土性	壤土	埴壤土	砂壤土	砂土
砂 (%)	56.0	48.0	70.5	97.0
シルト (%)	38.5	28.0	17.5	0.3
粘土 (%)	5.5	24.0	12.0	2.7
粘土鉱物	アロフェン	アロフェン	カオリナイト イライト	—
有機物含量 (%)	3.2	11.6	1.6	0.1
陽イオン交換容量 (me/100 g 乾土)	21.5	39.0	9.8	23.2
pH (H ₂ O)	6.9	5.3	4.6	6.6
最大含水量 (g/100 g 乾土)	125.7	85.7	38.3	51.0

—；測定データなし

試験方法：風乾し 2 mm の篩を通した各土壌を内径 3 cm のガラスカラムに高さ 30 cm となるように充填し（乾土 131~234 g 相当）、溶出液が透明になるまで蒸留水を通して土壌カラムを調製した。また別に、高さ 6 cm 相当（乾土 26~47 g）の各土壌にフェニル標識体のメタノール溶液（60 μ L）を乾土当り 0.5 ppm になるように添加して混合し、この処理土壌を対応する土壌カラムに上乘せた。25 \pm 2 $^{\circ}$ C の暗条件下で、蒸留水 350 mL（カラムの高さ 50 cm に相当する）を 2.0 mL/h の速度で滴下して溶出液を分画採取した。揮散性物質は 0.5 M 水酸化ナトリウム水溶液で捕集した。滴下後、土壌を 6 cm 毎に 6 個の画分（処理土壌、0~6 cm、6~12 cm、12~18 cm、18~24 cm、24~30 cm）に等分して燃焼分析に供し、溶出液は 2 連で LSC 分析に供した。武庫土壌の溶出液は、pH 1 に調整後、同容量の酢酸エチルで 3 回抽出し、抽出液を TLC 分析に供した。全土壌について、処理土壌画分を下記のスキームに従い処理し、TLC 分析に供して、ジエトフェンカルブおよび分解物の同定・定量を行った。



試験結果：各土壌の放射能分布について表 1 に示し、武庫土壌の溶出液中の放射能分布について表 2 に示した。

牛久、札幌および安土の各土壌では放射能は処理土壌および 0~6 cm 画分に、それぞれ 44.8~77.4%TAR および 14.3~41.4%TAR が存在し、溶出液中放射能は 0.4%TAR (%TAR：総処理放射能に対する割合(%)) 以下であった。有機物含量が 0.1%の武庫土壌では、溶出液中に 68.7%TAR の放射能が検出され、その約半分が 0~80 mL の溶出液画分に含まれていた。揮散性物質は全土壌について 0.1%TAR 未満であった。牛久、札幌および安土土壌の処理土壌の抽出液および武庫土壌の溶出液中の放射能の大部分は未変化のジエトフェンカルブであり、各処理土壌の抽出液中に 6-NO₂-DFC が認められたが、2.8%TAR 以下であった。安土、牛久、および札幌土壌において、17.0~48.4%TAR が結合性¹⁴Cであり、フミン酸画分よりもヒューミンおよびフルボ酸画分に多く分布していた。

以上の結果から、ジエトフェンカルブは畑地土壌からは容易に溶脱しないと考えられた。

表1 リーチング後の土壌カラムにおける放射能分布

	処理 ¹⁴ Cに対する割合 (%)			
	牛久土壌	札幌土壌	安土土壌	武庫土壌
処理土壌 ¹⁴ C	44.8	68.6	77.4	6.3
抽出液 ¹⁴ C	6.4	20.2	60.4	4.0
ジエトフェンカルブ	5.5	17.2	58.7	0.6
6-NO ₂ -DFC	0.1	2.0	0.9	2.8
その他	0.8	1.0	0.8	0.6
結合性 ¹⁴ C (土壌残渣)	38.4	48.4	17.0	2.3
フルボ酸	14.7	11.4	6.4	1.3
フミン酸	10.1	7.5	2.3	<0.1
ヒューミン	13.6	29.5	8.3	1.0
0~6 cm	41.4	25.0	14.3	4.8
6~12 cm	4.0	0.3	0.6	5.0
12~18 cm	0.5	0.1	0.1	3.7
18~24 cm	0.4	0.1	<0.1	2.6
24~30 cm	0.5	0.1	<0.1	4.1
溶出液	0.4	0.3	<0.1	68.7
揮散性物質	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
合計 ¹⁴ C	92.0	94.5	92.4	95.2

表2 武庫土壌の溶出液中放射能分布および分解物

	処理 ¹⁴ Cに対する割合 (%)		
	溶出液画分 (mL)		
	0~80	81~199	200~351
有機抽出層 ¹⁴ C	34.1	20.3	10.2
ジエトフェンカルブ	30.5	19.7	9.4
6-NO ₂ -DFC	<0.1	<0.1	<0.1
その他	0.6	0.6	0.8
水層 ¹⁴ C	0.6	1.4	2.2
合計 ¹⁴ C	34.7	21.7	12.4

ジエトフェンカルブの動植物および環境中における代謝分解

ジエトフェンカルブの哺乳動物、植物、土壌における代謝、分解、残留の要約は下記の通りであり、予想代謝経路を図1に、また、結果の概要を添付の表にまとめた。

動物：

フェニル基の炭素を ^{14}C で均一に標識したジエトフェンカルブを雌雄ラットに経口投与して代謝を調べた。10 mg/kg あるいは 300 mg/kg の割合で単回経口投与すると、投与した放射能のほとんどは投与後 48 時間以内に尿および糞中に排泄された。投与後 7 日間の ^{14}C 排泄率は 99~100% であり、主要排泄経路は尿中排泄 (80~88%) であった。血中および各種組織中の ^{14}C 濃度は投与後 0.5 あるいは 1 時間に最高値に達した後に速やかに減少し、 ^{14}C 組織残留は低かった。ジエトフェンカルブの尿中の主要代謝物は 4-OH-DFC の硫酸抱合体および 3-OEt-4-OH-AA の硫酸抱合体であった。また、4 種の含硫黄代謝物 (4-OH-5-MA-DFC、3-OEt-4-OH-5-MA-AA、4-OH-5-SMe-DFC、3-OEt-4-OH-5-SOMe-AA) が検出された。これら含硫黄代謝物の存在により、4-OH-DFC および 3-OEt-4-OH-AA の一部がグルタチオン抱合を受け、さらにシステイン抱合体等を経由して、各種含硫黄代謝物へと代謝されることが示された。フェニル基の炭素を ^{14}C で均一に標識した 4-OH-5-cysteine-DFC とラット肝サイトゾールとの *in vitro* 代謝の結果、4-OH-5-TLA-DFC が生成した。ラット *in vivo* では 4-OH-5-TLA-DFC が排泄物中に検出されなかったが、ラットにはジエトフェンカルブがシステイン抱合体を経て 4-OH-5-TLA-DFC へと代謝される経路が存在していると考えられた。ジエトフェンカルブの主要代謝反応は、1) 4-エトキシ基の脱エチル化、2) カーバメート結合の開裂、3) アミノ基のアセチル化、および 4) 前記の反応で生成したフェノール類と硫酸あるいはグルクロン酸との抱合体化であった。あらかじめ非標識ジエトフェンカルブを 10 mg/kg/day の割合で 14 日間連続投与しても、 ^{14}C 標識体の代謝に顕著な変化は認められなかった。いずれの投与群においても代謝に顕著な性差は認められなかった。

植物：

きゅうり

フェニル基の炭素を ^{14}C で均一に標識したジエトフェンカルブを 28 g ai/10 a の割合できゅうりの果実表面に 1 回塗布処理し、処理 3 日、7 日、10 日および 14 日後に果実を採取した。処理果実からの ^{14}C 回収率は、処理 7 日および 14 日後において 93.3% および 91.9% であった。果実における主要残留物として、未変化のジエトフェンカルブが処理 ^{14}C 量の 70.9~78.1% (76.0~85.0% TRR、TRR: 総残留放射能) 検出された。代謝分解物として 3-OH-DFC (遊離体、抱合体)、DFC- CH_2OH (遊離体、抱合体)、4-OH-DFC (抱合体)、DFC-COOH (抱合体) および DPO (遊離体) が生成したが、いずれも処理 ^{14}C 量の 2.1% (2.1% TRR) 以下であった。

ジエトフェンカルブのきゅうりにおける主要代謝分解経路はイソプロピルメチル基の酸化、フェニル基 3 あるいは 4 位の脱エチル化およびそれらに続く抱合体化であった。

きゅうり、ぶどう

イソプロピル基のメチン炭素あるいはフェニル基の炭素を均一に¹⁴Cで標識したジエトフェンカルブを、果実形成期のきゅうり葉面および第7~8葉期のぶどう葉面にそれぞれ1250 μg ai/葉および125 μg ai/葉の割合で1回塗布処理し、それぞれ処理30日および90日後まで経時的に植物全体を採取した。試験系からの¹⁴C回収率は処理30日後のきゅうりで49.6~55.8%、処理90日後のぶどうで31.2~36.6%であった。きゅうりの処理葉(処理30日後)では未変化のジエトフェンカルブは18.0~26.8%TRR残留しており、主要代謝物としてDCF-COOHの抱合体(15.3~16.3%TRR)および3-OH-DFCの遊離体と抱合体(含量値11.6~15.7%TRR)が検出され、その他の微量代謝物として、DPO(遊離体)および4-OH-DFC(抱合体)が生成した。一方、ぶどう処理葉(処理90日後)でのジエトフェンカルブ残留量は61.6~71.0%TRRであり、微量代謝物としてDFC-COOH(抱合体)、3-OH-DFC(抱合体)およびDPO(遊離体)が検出された。

ジエトフェンカルブのきゅうり及びぶどうにおける主要代謝分解経路は、イソプロピルメチル基の酸化、フェニル基3あるいは4位の脱エチル化およびそれらに続く抱合化であった。

ぶどう

イソプロピル基のメチン炭素あるいはフェニル基の炭素を均一に¹⁴Cで標識したジエトフェンカルブを、収穫35日前の果実着色期のぶどう果実および葉に50 g ai/10 aの割合で1回散布した。散布35日後の果実における¹⁴C残留濃度は2.831~5.464 ppmであった。未変化のジエトフェンカルブは19.9~23.2%TRR残留しており、主要代謝物として抱合体である4-Glc-DFC(14.6~15.5%TRR)および4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC(20.7~21.5%TRR)が生成した。また、その他の微量代謝物として4-OH-DFC、4-Glc-5-TLA-DFCおよび4-OH-5-TLA-DFCが検出された。

ジエトフェンカルブのぶどうにおける主要代謝分解経路はフェニル基4位の脱エチル化とそれに続くメルカプト乳酸およびグルコースの抱合化であった。

トマト

イソプロピル基のメチン炭素あるいはフェニル基の炭素を均一に¹⁴Cで標識したジエトフェンカルブを収穫10日および3日前の成熟期のトマト植物に38 g ai/10 aの割合で計2回散布した。最終散布3日後の果実における¹⁴C残留濃度は0.085~0.116 ppmであった。主要残留物は未変化のジエトフェンカルブ(69.0~72.9%TRR)であり、代謝物として4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC、4-OH-DFC/DFC-COOH、4-Glc-DFC/4-Glc-5-TLA-DFC、4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFCおよびDPOが生成したがいずれも2.6%TRR以下であった。

ジエトフェンカルブのトマトにおける主要代謝分解経路はイソプロピルメチル基の酸化とそれに続く分子内環化、もしくはフェニル基4位の脱エチル化とそれに続くメルカプト乳酸およびグルコースの抱合化であった。

レタス

イソプロピル基のメチン炭素あるいはフェニル基の炭素を均一に ^{14}C で標識したジエトフェンカルブを収穫 35 日、28 日、21 日、14 日および 7 日前に 38 g ai/10 a の割合で計 5 回散布した。最終散布 7 日後の葉における ^{14}C 残留濃度は 1.760~2.023 ppm であった。主要残留物は未変化のジエトフェンカルブ (52.0~57.2%TRR) であり、微量代謝物として 4-OH-DFC、4-Glc-DFC/4-Glc-5-TLA-DFC、4-OH-5-TLA-DFC および 4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC が生成したが、いずれも 1.9%TRR 以下であった。

ジエトフェンカルブのレタスにおける主要代謝分解経路はフェニル基 4 位の脱エチル化とそれに続くメルカプト乳酸およびグルコースの抱合化であった。

土壌中代謝物 6-NO₂-DFC のきゅうりにおける取込み

フェニル基の炭素を ^{14}C で均一に標識した 6-NO₂-DFC を 0.1 ppm の割合で土壌に混和後、第 2 本葉期のきゅうり苗を移植し、移植 56 日および 62 日後に植物全体 (果実および茎葉部) を採取した。62 日後の果実および茎葉部での ^{14}C 濃度は <0.0008 ppm (処理 ^{14}C 量に対して <0.019%) および 0.0027 ppm (同 0.068%) であり、6-NO₂-DFC の土壌からきゅうりへの取込みは殆どなかった。

土壌:

好氣的土壌中動態試験

イソプロピル基のメチン炭素あるいはフェニル基の炭素を均一に ^{14}C で標識したジエトフェンカルブを牛久土壌 (壤土、pH6.9、有機物含量 3.2%) および安土土壌 (砂壤土、pH5.1、有機物含量 0.8%) に乾土あたり 0.5 ppm の割合で添加し、好気条件下 25℃ の暗所で水分含量を 0.33 bar 容水量の 75% に調整し、270 日間インキュベーションした。試験期間中の物質収支は 77.0~100.0% であった。ジエトフェンカルブは、牛久土壌および安土土壌でそれぞれ 6.2 日および 0.3 日の消失半減期で速やかに分解された。代謝分解物として 6-NO₂-DFC が最大で処理 ^{14}C 量の 4.7% (イソプロピル標識体、安土土壌、処理 1 日後) 検出され、他の代謝分解物も複数検出されたが、いずれも 8.0% 以下 (最大成分: イソプロピル標識体、安土土壌、処理 1 日後、TLC 原点部分) であった。土壌の抽出残渣中の ^{14}C は処理 3~60 日後に最大 (添加 ^{14}C の 43.2~73.5%) となり 270 日後には 28.2~66.2% に減少した。処理 270 日後に生成した $^{14}\text{CO}_2$ は 30.5~57.0% であった。

ジエトフェンカルブの好気土壌中における主要分解経路は、フェニル基 6 位のニトロ化であり、最終的に二酸化炭素へ無機化あるいは土壌へ強固に吸着された。

土壌表面光分解試験

イソプロピル基のメチン炭素あるいはフェニル基の炭素を均一に ^{14}C で標識したジエトフェンカルブを、ドイツ土壌 (埴土) を用いて調製した土壌薄層に 0.5 μg/g の濃度で均一に処理し、20±1℃ で 10 日間、波長 290 nm 未満の光をフィルター除去したキセノンランプ

光(551 W/m², 300~800 nm)を明暗周期 12 時間で照射した。試験期間中の物質収支は 91.3%~101.7%と良好であった。光照射下においてジエトフェンカルブの分解は促進され、自然太陽光下(北緯 40 度)における半減期は 5.2~5.9 日であった。主要分解物は 6-NO₂-DFC(最大 28.9%、7 日後)および 4-OH-DFC(最大 9.8%、11 時間後)であり、その他複数の未同定分解物が認められたが、生成量はいずれも 5%未満と微量であった。光照射区において処理 10 日後までに生成した ¹⁴C₂ならびに土壤残渣はそれぞれ処理 ¹⁴C 量の 15.3~16.9%(イソプロピル標識体~フェニル標識体)および 34.0~39.2%(同)であった。土壤残渣についてアルカリ分画による化学的特徴付けを行った結果、いずれもヒューミン画分に最も多く放射能が存在し(光照射区; 19.0~22.5%)、次いでフルボ酸(光照射区; 13.0~13.7%)で、フミン酸に分布した放射能は微量(3.3%以下)であった。

光照射下、ジエトフェンカルブは土壤表面において分解が促進され、その主要分解経路はフェニル基 6 位のニトロ化およびフェニル基 4 位の脱エチル化であり、最終的に二酸化炭素へ無機化あるいは土壤へ強固に吸着された。

土壤吸着性

ジエトフェンカルブの濃度が 0.048、0.48、0.96 および 4.8 μg/mL となるように調整した 0.01 M 塩化カルシウム水溶液 20 mL を 4 種類の標準土壤[十勝土壤(埴壤土)、牛久土壤(シルト質埴壤土)、和歌山土壤(軽埴土)、宮崎土壤(砂土)]各 5 g と純水 5 mL の懸濁試料に加えて、25℃の暗条件下で 24 時間振とうして土壤吸着性試験を実施した。フロイントリッヒ等温式より求めた吸着係数 (K^{ads}_p) および有機炭素吸着係数 (K^{ads}_{Foc}) はそれぞれ 1.36~7.41 および 87.2~177 であり、McCall 等による土壤移行度によれば“High~Medium”に分類された。

土壤溶脱性

フェニル基の炭素を均一に ¹⁴C で標識したジエトフェンカルブを 4 種類の土壤[牛久(壤土)、札幌(埴壤土)、安土(砂壤土)、武庫(砂土)]に乾土あたり 0.5 ppm となるよう処理した。別途、内径 3 cm のガラスカラムに各土壤を 30 cm の深さに均一に充填して土壤カラムを作成し、その上層に各処理土壤を添加後、直ちに 2.0 ml/時の流速で合計 350 mL の蒸留水を滴下した。有機物含量が 0.1%と極めて低い武庫砂では溶出液に処理 ¹⁴C の 68.7%が検出され、その大部分は未変化のジエトフェンカルブであった。一方、畑地土壤である牛久・札幌・安土土壤では処理 ¹⁴C の大部分が土壤カラム上層部(処理部および 0~6 cm 画分)に分布し、溶出液中の ¹⁴C は 0.4%以下とわずかであった。土壤抽出液中よりジエトフェンカルブおよび 6-NO₂-DFC がそれぞれ処理 ¹⁴C の 5.5~58.7%、および 0.1~2.0%検出された。以上のことから、ジエトフェンカルブおよびその代謝分解物の畑地土壤中での下方移行性は低いものと考えられた。

水中:

加水分解試験

イソプロピル基のメチン炭素あるいはフェニル基の炭素を均一に ^{14}C で標識したジエトフェンカルブを pH 3、5、7、9 または 11 の滅菌緩衝液に添加して 1 mg/L の試験水を調製後、 $25\pm 1^\circ\text{C}$ 、 $40\pm 1^\circ\text{C}$ あるいは $60\pm 1^\circ\text{C}$ の暗条件下で 30 日間インキュベーションして加水分解試験を実施した。ジエトフェンカルブは pH 3、5、7 および 9 緩衝液中の各温度、並びに pH 11 緩衝液中の 25°C および 40°C で安定であったが、pH 11、 60°C においてのみ半減期 30.2 日（フェニル標識体処理）で徐々に加水分解を受け、主要分解物として DEA が最大 23.8%（30 日後）検出された。

ジエトフェンカルブは自然水中で通常認められる pH 5~9 領域では加水分解的に安定であったが、高温・強塩基性条件下においてはカーバメート結合の開裂により分解した。

水中光分解試験

イソプロピル基のメチン炭素あるいはフェニル基の炭素を均一に ^{14}C で標識したジエトフェンカルブを滅菌した純水（pH 6.2~6.9）および自然水（英国 West Yorkshire 州 Chevin Forest Park の河川水、pH 7.4~8.0）に 1%未満のアセトニトリルを溶解助剤として添加して約 1 mg/L の試験水を調製後、 $25\pm 2^\circ\text{C}$ で 15 日間、波長 290 nm 未満の光をフィルター除去したキセノンランプ光（約 16.2 W/m^2 、300~400 nm）を連続照射した。試験期間中の物質収率は 93.6%~102.7%と良好であった。光照射下においてジエトフェンカルブの分解は促進され、さらにその分解は純水中よりも自然水中においてより速やかに進行し、自然太陽光下（東京、春）での半減期は純水中で 256~262 日、自然水中で 21.3~22.7 日であった。純水中において処理 ^{14}C 量の 10%を越える分解物は検出されなかったが、自然水中ではイソプロピル標識体から IPC（最大 16.9%、15 日後）および IPA（同 31.7%、13 日後）が主に認められ、さらにフェニル標識体試料から $^{14}\text{CO}_2$ が最大 20.1%（13 日後）生成した。

光照射下、ジエトフェンカルブは特に自然水中で分解が促進され、その主要分解経路はカーバメート結合の開裂に続くカルバモイル基の脱離であり、最終的には二酸化炭素へ無機化された。

図1 ジェトフェンカルブの動植物、土壌および水中における代謝分解経路

表1 代謝分解の概要

動物代謝	ラット	試料	投与または処理放射能に対する割合 (%)																								抽出残量	揮発性 (CO ₂ ほか)	その他	総回収率
			シフトフェノール	4-OH-DFC	3-OEt-4-OH-AA	DFC-COOH	3-OH-DFC	DPO	6-NO ₂ -DFC	DFC-CH ₂ OH	3,4-OEt-6-OH-AA	DEA	IPC	IPA	4-Glc-DFC	4-Glc-5-TLA-DFC	4-OH-5-TLA-DFC	4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC	4-OH-5-SMe-DFC	3-OEt-4-OH-PhO	3-OEt-4-OH-5-SOMe-AA	4-OH-5-MA-DFC	3-OEt-4-OH-5-MA-AA	3-OEt-4-OH-5-MA-AA	未特定					
動物代謝	[フェニル ¹⁴ C]シフトフェノール、単回経口投与、10 mg/kg (低用量)	0-48時間尿	雄	ND	F ¹⁴ O.1 S ¹⁴ 39.6 G ¹⁴ 5.9	F ¹⁴ O.1 S16.9 G2.6	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	NA	18.0 ^g	83.2	
		0-48時間糞	雄	1.7	3.7	ND	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	4.5	NA	4.9 ^g	14.8	
		0-48時間尿	雌	ND	F<0.1 S37.1 G10.5	F0.1 S14.3 G3.4	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	NA	16.7 ^g	82.1	
		0-48時間糞	雌	0.1	3.1	ND	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	5.4	NA	7.7 ^g	16.3	
	[フェニル ¹⁴ C]シフトフェノール、単回経口投与、300 mg/kg (高用量)	0-48時間尿	雄	ND	F0.3 S48.7 G6.8	F0.1 S13.6 G2.1	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	NA	15.3 ^g	86.9	
		0-48時間糞	雄	0.9	2.4	ND	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	3.2	NA	4.6 ^g	11.1	
		0-48時間尿	雌	ND	F0.7 S41.6 G9.4	F0.1 S9.9 G2.5	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	NA	17.3 ^g	81.5	
		0-48時間糞	雌	0.9	3.9	ND	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	3.7	NA	6.2 ^g	14.7	
	[フェニル ¹⁴ C]シフトフェノール、反復経口投与、10 mg/kg	0-48時間尿	雄	ND	F0.1 S35.0 G13.1	F0.1 S17.4 G2.4	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	NA	19.0 ^g	87.1	
		0-48時間糞	雄	0.3	2.1	ND	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	4.2	NA	3.8 ^g	10.4	
		0-48時間尿	雌	ND	F<0.1 S30.0 G15.5	F0.1 S13.2 G2.9	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	NA	17.5 ^g	79.3	
		0-48時間糞	雌	0.5	3.8	ND	ND	<0.1	<0.1	NA	NA	<0.1	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	6.8	NA	7.4 ^g	18.5	
	[フェニル ¹⁴ C]シフトフェノール、単回経口投与、10 mg/kg	0-48時間尿	雄	ND	S38.6 G12.3	S16.7	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	16.1	-	<0.1	3.1	86.6	
		0-48時間糞	雄	1.0 ^g	3.7	ND	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	4.1	4.3	ND	0.3	13.5
		0-48時間尿	雌	ND	S37.9 G10.5	S13.5	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	16.0	-	NA	5.0	82.9
		0-48時間糞	雌	1.5 ^g	3.8	ND	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	4.2	5.6	NA	0.3	15.4
	[17β-ヒドロキシフェニル ¹⁴ C]シフトフェノール、単回経口投与、10 mg/kg	0-48時間尿	雄	ND	S39.4 G10.6	ND	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	10.5	-	NA	1.1	61.7
		0-48時間糞	雄	0.9 ^g	3.7	ND	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	3.2	3.4	NA	0.1	11.3
		0-48時間呼吸	雄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	20.7	-	20.7
		0-48時間尿	雌	ND	S38.0 G11.3	ND	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	9.3	-	NA	0.9	59.5
		0-48時間糞	雌	1.3 ^g	4.3	ND	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	3.7	5.3	NA	0.3	14.6
		0-48時間呼吸	雌	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	19.3	-	19.3
	[フェニル ¹⁴ C]シフトフェノール、単回経口投与、10 mg/kg	0-48時間尿	雄	ND	F0.5 S3.1 G0.0 S/G ¹⁴ S2.1	F0.1 S/G 18.9 ^g	F0.1 S/G 18.9 ^g	ND	ND	NA	NA	NA	NA	-	-	NA	NA	ND	NA	F0.1 S/G 0.9	F0.1 S/G 18.9 ^g	F0.0 S/G 0.7	F0.0 S/G 0.7	S/G 0.5	S/G 2.8	6.6	-	NA	2.2	89.2
		0-48時間糞	雄	0.3	2.5	ND	0.5	ND	ND	NA	NA	NA	NA	-	-	NA	NA	ND	NA	ND	ND	ND	0.2	ND	ND	1.7	2.8	NA	0.8	8.7

本資料に記載された情報に係る権利及び内容の責任は住友化学株式会社にある。

表1 代謝分解の概要 (続き)

試料		投与または処理放射能に対する割合 (%)																				未同定	抽出 残液	揮発性 (CO ₂ は か)	その他	総回 収率								
		ジエトフ ン	4-OH- DFC	3-OEt- 4-OH- AA	DFC- COOH	3-OH- DFC	DPO	6-NO ₂ - DFC	DFC- CH ₂ OH	3,4- OEt-6- OH-AA	DEA	IPC	IPA	4-Glc- DFC	4-Glc- 5-TLA- DFC	4-OH- 5-TLA- DFC	4-OH-5- (O-Glc- TLA)- DFC	4-OH- 5-SMe- DFC	3-OEt- 4-OH- PHO	3-OEt- 4-OH-5- SOMe-AA	4-OH- 5-MA- DFC						3-OEt- 4-OH-5- MA-AA	3-OEt- 4-OH-5- OACA- AA						
好気的 条件	牛久土壌、 乾土あたり 0.5 ppm 処理、 25℃、暗所	[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	7日後	43.4	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.2	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	1.4	46.8	1.6	1.7	95.1					
		[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	30日後	7.4	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.1	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	1.0	69.6	8.7	1.9	88.7				
		[イブ ¹⁴ C] ジエトフ ン	270日後	0.3	NA	NA	NA	NA	NA	NA	<0.1	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.5	66.2	30.7	0.6	98.3				
	安土土壌、 乾土あたり 0.5 ppm 処理、 25℃、暗所	[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	7日後	42.4	NA	NA	NA	NA	NA	NA	<0.1	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	1.2	32.6	9.3	1.1	86.6				
		[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	30日後	7.2	NA	NA	NA	NA	NA	NA	<0.1	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.9	43.2	29.1	1.9	82.3				
		[イブ ¹⁴ C] ジエトフ ン	270日後	0.3	NA	NA	NA	NA	NA	NA	<0.1	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.3	29.3	49.1	0.3	79.3				
嫌氣的 条件	牛久土壌、 乾土あたり 0.5 ppm 処理、 27℃、暗所	[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	7日後	0.8	NA	NA	NA	NA	NA	4.2	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	10.5 ¹⁹⁾	60.6	16.1	1.9	94.1					
		[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	30日後	0.2	NA	NA	NA	NA	NA	3.5	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	6.8	52.5	26.6	2.4	92.0					
		[イブ ¹⁴ C] ジエトフ ン	270日後	<0.1	NA	NA	NA	NA	NA	2.4	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	3.3	32.7	58.7	0.9	98.0					
	安土土壌、 乾土あたり 0.5 ppm 処理、 27℃、暗所	[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	7日後	1.0	NA	NA	NA	NA	NA	3.7	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	11.7 ²⁰⁾	48.2	19.9	2.3	86.8				
		[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	30日後	0.2	NA	NA	NA	NA	NA	3.1	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	8.4	48.3	29.0	2.1	91.1				
		[イブ ¹⁴ C] ジエトフ ン	270日後	<0.1	NA	NA	NA	NA	NA	2.9	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	4.3	28.2	49.4	1.0	85.8				
加水分解	[フェル- ¹⁴ C]ジ エトフ ン、試験濃度 1 mg/L、60℃	pH 3	30日後	98.5	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	0.4	NA	0.5	99.4					
		pH 5	30日後	101.8	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	0.2	NA	0.6	102.6				
		pH 7	30日後	101.7	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	1.2	NA	0.7	103.6				
	[イブ ¹⁴ C]ジ エトフ ン、試験濃度 1 mg/L、60℃	pH 9	30日後	108.5	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	0.9	NA	2.0	111.4				
		pH 11	30日後	50.5	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	23.8	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	ND	10.0	NA	23.9 ²¹⁾	108.5				
		pH 3	30日後	104.5	NA	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	-	NA	ND	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	ND	0.1	NA	0.9	105.5				
水中光分解	純水、試験濃 度 1 mg/L、 キトン光照射	[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	7日後	93.6	ND	NA	NA	ND	ND	ND	NA	NA	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	3.9	-	ND	1.8	99.2				
		[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	15日後	87.8	ND	NA	NA	ND	ND	ND	NA	NA	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	6.5	-	2.1	1.2	97.6				
		[イブ ¹⁴ C] ジエトフ ン	7日後	92.8	ND	-	NA	ND	ND	ND	NA	-	-	ND	ND	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	NA	-	-	2.7	-	0.6	2.2	98.3	
	自然水、試験 濃度 1 mg/L、 キトン光照射	[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	7日後	88.6	ND	-	NA	ND	ND	ND	NA	-	-	2.3	1.8	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	NA	-	-	2.1	-	2.7	1.6	99.2
		[フェル- ¹⁴ C] ジエトフ ン	15日後	58.7	ND	NA	NA	ND	ND	ND	NA	NA	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	26.7 ²²⁾	-	9.1	1.0	95.5			
		[イブ ¹⁴ C] ジエトフ ン	15日後	44.4	ND	NA	NA	ND	ND	ND	NA	NA	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	31.6 ²³⁾	-	16.2	1.8	94.0			
水中光分解	自然水、試験 濃度 1 mg/L、 キトン光照射	[イブ ¹⁴ C] ジエトフ ン	7日後	60.3	ND	-	NA	ND	ND	ND	NA	-	-	10.0	10.2	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	NA	-	-	7.3	-	8.7 (うち IPA 8.5)	1.9	98.3
		[イブ ¹⁴ C] ジエトフ ン	15日後	34.7	ND	-	NA	ND	ND	ND	NA	-	-	16.9	10.0	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	NA	-	-	13.2 ²⁴⁾	-	19.4 (うち IPA 18.4)	1.5

表1 代謝分解の概要 (続き)

試料			投与または処理放射能に対する割合 (%)																											
			ジエトフェンカルブ	4-OH-DFC	3-OEt-4-OH-AA	DFC-COOH	3-OH-DFC	DPO	6-NO ₂ -DFC	DFC-CH ₂ OH	3,4-OEt-6-OH-AA	DEA	IPC	IPA	4-Glc-DFC	4-Glc-5-TLA-DFC	4-OH-5-TLA-DFC	4-OH-5-(O-Glc-TLA)-DFC	4-OH-5-SMe-DFC	3-OEt-4-OH-PHO	3-OEt-4-OH-5-SOMe-AA	4-OH-5-MA-DFC	3-OEt-4-OH-5-MA-AA	3-OEt-4-OAc-AA	未同定	抽出残量	揮発性 (CO ₂ ほか)	その他	総回収率	
分解要因	土壌表面に約0.5 μg/g添加、紫外光照射	[7-エチル- ¹⁴ C]ジエトフェンカルブ	4日後	46.5	0.7	NA	ND	NA	ND	11.7	ND	NA	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	1.1	29.6	3.0	1.8	94.3
			10日後	12.0	0.9	NA	ND	NA	ND	18.0	ND	NA	NA	NA	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	3.5	39.2	16.9	2.1	92.5
			4日後	36.3	1.7	-	ND	NA	ND	16.1	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	NA	-	-	-	5.9	26.9	8.8	2.3	97.7
			10日後	12.8	ND	-	ND	NA	ND	21.9	ND	-	-	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	-	NA	-	-	-	1.7	34.0	16.7	4.4	91.3

NA: 分析せず, ND: 検出されず, -: 分析対象無しあるいは標識位置を含まない代謝物であるため確認できず
 *1: F: 遊離体, S: 硫酸抱合体, G: グルクロン抱合体, S/G: 硫酸抱合体および/またはグルクロン抱合体, C: グルコース抱合体
 *2: DFC-COOH: グルクロン抱合体, DPO, 3-OH-DFC および 3,4-OEt-6-OH-AA を含む (いずれの代謝物も投与量の0.1%未満)
 *3: 未同定代謝物 (2個) を含む
 *4: 3-OEt-4-OH-AA, DFC-COOH および 3-OEt-4-OH-PHO の合計 (遊離体 0.1%, 硫酸抱合体および/またはグルクロン抱合体 18.9%)
 *5: きゅうり果実中の総残留放射能に対する割合 (%TRR) を示す
 *6: DPO は、分析操作中に DFC-COOH の分子内環化により生成
 *7: TLC 原点に留まる高極性代謝分解物
 *8: きゅうり又はぶどうの処理葉と非処理部の合計に対する割合を示す
 *9: 4個の成分からなり、最大4.8%TRR
 *10: 4個の成分からなり、最大4.6%TRR
 *11: 総残留放射能 (TRR) に対する割合 (%) を示す。括弧内の数値は、ジエトフェンカルブ換算濃度 (ppm) を示す
 *12: 痕跡量検出されたことを示す
 *13: 23個の成分からなり、最大5.8%TRR (0.163 ppm)
 *14: 23個の成分からなり、最大8.2%TRR (0.448 ppm)
 *15: 2成分 (6.9%TRR, 0.008 ppm; 1.7%TRR, 0.002 ppm) からなる
 *16: HPLC で保持されない複数の高極性代謝分解物の集合体
 *17: 15個以上の成分からなり、最大2.5%TRR (0.051 ppm)
 *18: 17個以上の成分からなり、最大3.6%TRR (0.063 ppm)
 *19: 6個の成分からなり、最大5.3%
 *20: 6個の成分からなり、最大5.6%
 *21: 8個の微量分解物からなる
 *22: 複数成分からなり、最大4.5%
 *23: 複数成分からなり、最大7.3%
 *24: 複数成分からなり、最大6.9%
 *25: 生成速度 (nmol/hr/mg protein) で表示した。

