

## EPI suite の概要と簡易使用マニュアル

<b>モデル名称</b>	<b>EPI suite</b>		
<b>モデルの種類</b>	化学物質の物性等情報の推算ツール		
<b>開発国</b>	アメリカ	<b>開発機関 開発者</b>	米国 EPA
<b>入手方法 (URL・価格等)</b>	下記、URLより無料でダウンロードできる。 <a href="http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuitedl.htm">http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuitedl.htm</a>		
<b>モデルの 目的概要</b>	<p>“The Estimations Programs Interface for Windows”の略。米国 EPA と Syracuse 社が共同開発したソフトウェアであり、化学物質の構造をもとに各物質の物性値を予測・算出するモデル。実測値の得られない場合に目安として計算結果を使用できる。本ソフトウェアは、米国 EPA が TSCA の新規化学物質の審査に活用しているなど、リスク評価のために多方面で用いられている。以下に本ソフトウェアに組み込まれている予測モデルの一部を示す。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• AOPWIN : estimates atmospheric oxidation rates</li> <li>• BCFWIN - estimates bioconcentration factor (BCF)</li> <li>• BIOHCWIN - estimates biodegradation of hydrocarbons</li> <li>• BIOWIN - estimates biodegradation probability</li> <li>• ECOSAR - estimates aquatic toxicity (LD50, LC50)</li> <li>• HENRYWIN - estimates Henry's law constant</li> <li>• HYDROWIN - estimates aqueous hydrolysis rates (acid-, base-catalyzed)</li> <li>• KOAWIN - estimates octanol-air partition coefficient</li> <li>• KOWWIN - estimates octanol-water partition coefficient</li> <li>• MPBPWIN - estimates melting pt, boiling pt, and vapor pressure</li> <li>• PCKOCWIN - estimates soil sorption coefficient (Koc)</li> <li>• WSKOWWIN - estimates water solubility (from log Pow)</li> <li>• WATERNT - estimates water solubility (using atom-fragment methodology)</li> </ul> <p>上記以外に、化学物質の化学式や構造、分子量等も記載されている。</p>		

## 操作手順

### 1) EPI suite の入手方法

本ソフトウェアはインターネット上で、無料でダウンロードすることが出来る。そのため、下記の URL にアクセスしてファイルをダウンロードする。

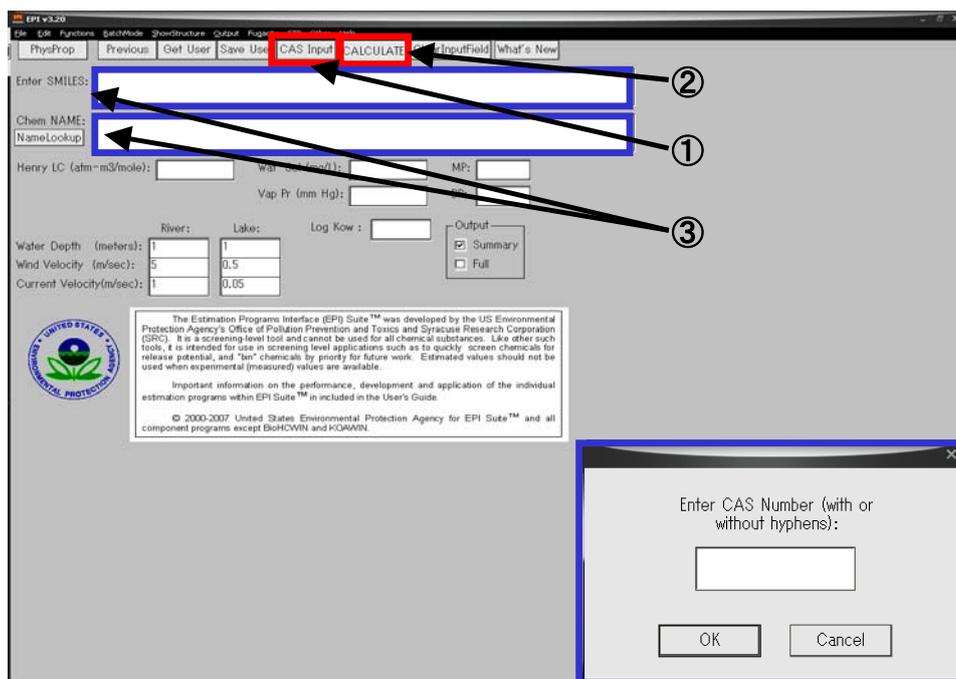
URL : <http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuitedl.htm>

なお、最新版は ver.4.0 (2009 年 2 月現在)。※2009.1 バージョンアップのため要更新

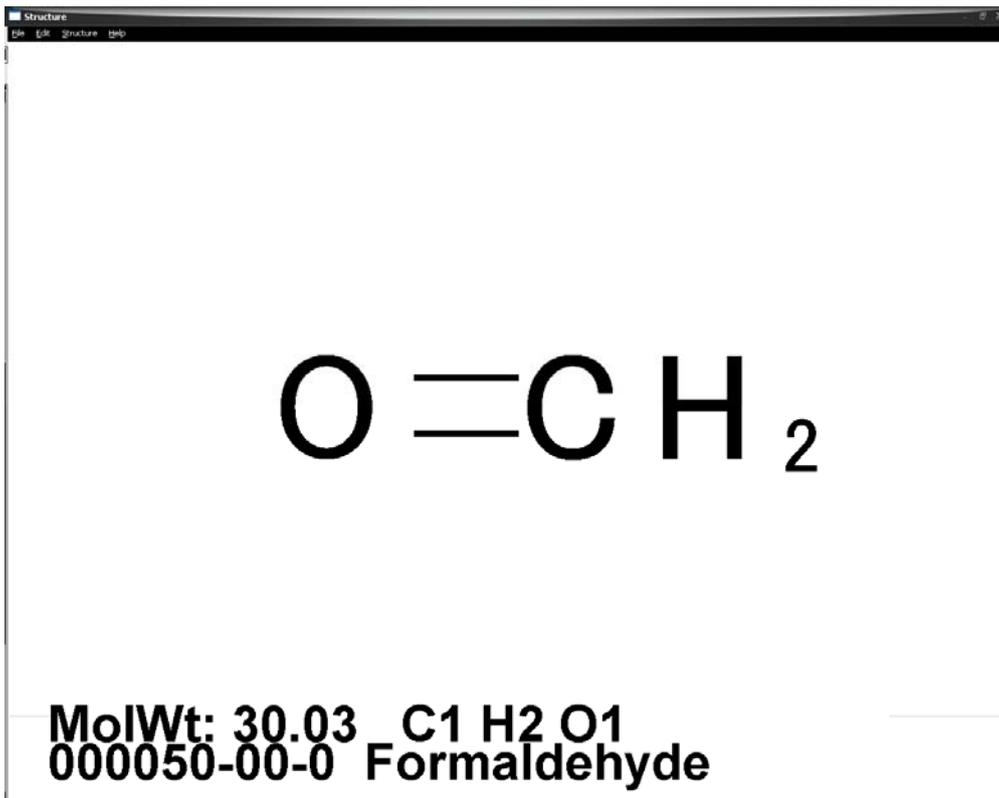
### 2) EPI suite の使用方法

ダウンロードした後に EPI suite を開くと、以下のような画面 (1) が表示される。そこでまず、①「CAS Input」をクリックする。すると、画面 (1) 右下に示したような画面が表示されるため、ここに検索したい物質の CAS 番号を入力する (例:ホルムアルデヒド「50-00-0」)。入力を終えたら、「OK」をクリックする。すると、画面 (1) の③に物質名と構造が表記されるため、検索したい物質で間違いがないかを確認する。確認後、②「CALCULATE」をクリックする。なお、画面 (1) の左側にある「Name Lookup」をクリックすると物質の名前で検索することが可能 (英語のみ) であるが、同一物質でも呼び名が何通りもある場合があるため (慣用名、OPAC 名…etc)、確実に検索したい物質を探すのであれば、CAS 番号を用いて検索することが望ましい。

②「CALCULATE」をクリックすると、ソフトウェアが計算をし、最終的に物質の構造が記載された画面 (2) および各予測モデル値などが記載された画面 (3) が表示される。表示された画面 (3) から必要な情報を確認する。実測値と推算値を誤って入力しないように注意する。基本的にコピー&貼付できないため、数値は手入力となる。



画面 (1)



画面 (2)

EPI Results

Print EPA Upload Save Results Copy Help

SMILES : O=C  
 ICHEM : Formaldehyde  
 CAS NUM: 000050-00-0  
 MOL FOR: C1 H2 O1  
 MOL WT: 30.03

化学式  
分子量

----- EPI SUMMARY (v3.20) -----

Physical Property Inputs:  
 Water Solubility (mg/L): -----  
 Vapor Pressure (mm Hg): -----  
 Henry LC (atm-m3/mole): -----  
 Log Kow (octanol-water): -----  
 Boiling Point (deg C): -----  
 Melting Point (deg C): -----

Log Octanol-Water Partition Coef (SRC):  
 Log Kow (KOWWIN v1.67 estimate) = 0.35  
 Log Kow (Exper. database match) = 0.35  
 Exper. Ref: Hansch,C et al. (1995)

Octanol-水分配係数(logPow)【推算値】  
 Octanol-水分配係数(logPow)【実測値】  
 ※実測値がない場合は記載されないので注意。

Boiling Pt, Melting Pt, Vapor Pressure Estimations (MPBPWIN v1.42):  
 Boiling Pt (deg C): 9.50 (Adapted Stein & Brown method)  
 Melting Pt (deg C): -110.94 (Mean or Weighted MP)  
 VP(mm Hg,25 deg C): 3.49E+003 (Mean VP of Antoine & Grain methods)  
 MP (exp database): -92 deg C  
 BP (exp database): -19.1 deg C  
 VP (exp database): 3.89E+03 mm Hg at 25 deg C

沸点  
融点  
蒸気圧 } 【推算値】  
 沸点  
融点  
蒸気圧 } 【実測値】

Water Solubility Estimate from Log Kow (WSKOW v1.41):  
 Water Solubility at 25 deg C (mg/L): 5.702e+004  
 Log Kow used: 0.35 (expkow database)  
 no-melting pt equation used  
 Water Sol (Exper. database match) = 4e+005 mg/L (20 deg C)  
 Exper. Ref: PICKRELL,JA ET AL. (1983)

水溶解度【推算値】  
 水溶解度【実測値】

Water Sol Estimate from Fragments:  
 Wat Sol (v1.01 est) = 3.8694e+005 mg/L  
 Wat Sol (Exper. database match) = 400000.00  
 Exper. Ref: PICKRELL,JA ET AL. (1983)

ECOSAR Class Program (ECOSAR v0.99h):  
 Class(es) found:  
 Aldehydes

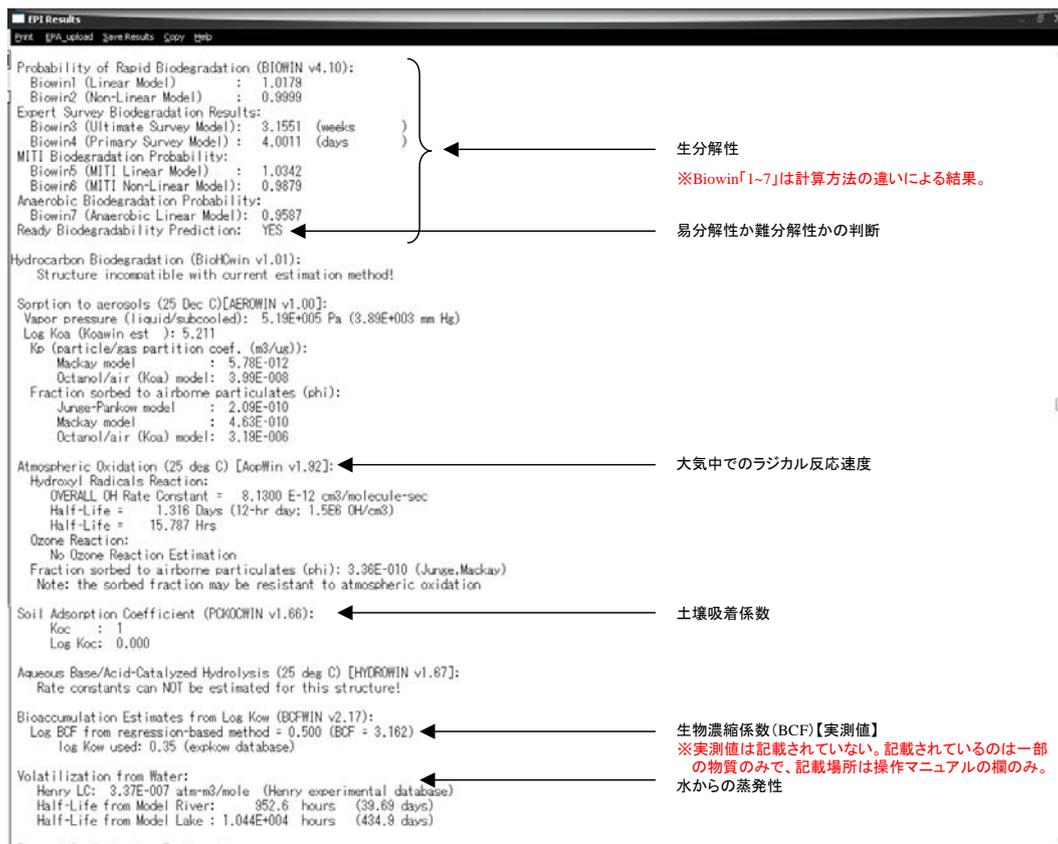
Henrys Law Constant (25 deg C) [HENRYWIN v3.10]:  
 Bond Method: 9.29E-005 atm-m3/mole  
 Group Method: 6.14E-005 atm-m3/mole  
 Exper Database: 3.37E-07 atm-m3/mole  
 Henrys LC [WP/WSol estimate using EPI values]: 5.267E-004 atm-m3/mole

ヘンリー定数【実測値】  
 ヘンリー定数【推算値】

Log Octanol-Air Partition Coefficient (25 deg C) [KOWWIN v1.10]:  
 Log Kow used: 0.35 (exp database)  
 Log Kaw used: -4.861 (exp database)  
 Log Koa (KOWWIN v1.10 estimate): 5.211  
 Log Koa (experimental database): None

Octanol-空気分配係数【推算値】  
 Octanol-空気分配係数【実測値】

画面 (3) No.1



画面 (3) No.2

### 3) KOWWIN、BCFWIN 並びに BIOWIN の推算法についての紹介【参考資料】

以降に化学物質の曝露量を推算する際に重要なパラメータである、生物濃縮性 (KOWWIN、BCFWIN)、生分解性 (BIOWIN) について、概要と推算方法について紹介する。

#### ①KOWWIN

米国 EPA の EPI suite では、有機化合物 (有機珪素化合物、有機塩化合物含む) を対象として、以下の式に基づいて logPow (Pow : オクタノール-水分配係数) の推算値を算出している。

$$\log\text{Pow} = \sum (f_i n_i) + \sum (c_i n_i) + 0.229$$

$f_i$  はフラグメント定数、 $c_i$  は補正係数、 $n_i$  は構造中のフラグメントの数を差す。ここで言うフラグメント定数とは、化学物質の化学構造を任意に分割したものである。またフラグメント定数は注目する原子とその周りの環境を記述したものであり、C,H,O,N,S とハロゲン 4 種(F,Cl,Br,I)の計 9 種に対して定められている。補正係数とは、立体構造による相互作用や水素結合、極性構造による影響を考慮した定数で、環に置換期を含むものとその

他の構造の 2 種類に大別されている。

さらに、pH によって logPow 値が変化する化合物については、以下の補正式を用いて算出した実測値と、次式から算出した推算式がほぼ一致するとしている。

$$\log\text{Pow corrected} = \log\text{Pow pH} + \log(1+10^{\text{pH}-\text{pKa}})$$

## ②BCFWIN

米国 EPA の EPI suite では、BCF 推算値を以下のようにして算出している。なおここで言うイオン解離性物質とは、Carboxylic acid (カルボン酸)、Sulfonic acid (スルホン酸)、Sodium, potassium, and salts of sulfonic acid (スルホン酸ナトリウム、カリウム、他の塩)、あるいは Compounds having a nitrogen with +5 valence (e.g. quaternary ammoniums) (第四級アンモニウムのような+5 価の窒素有する化合物) であると定義されている。

### ・ 非イオン解離性物質

$$\log \text{BCF} = 0.77 \log \text{Pow} - 0.70 + \text{Sum F(i)} \quad (\log \text{Pow } 1.0 \text{ to } 7.0)$$

$$\log \text{BCF} = -1.37 \log \text{Pow} + 14.4 + \text{Sum F(i)} \quad (\log \text{Pow} > 7.0)$$

$$\log \text{BCF} = 0.50 \quad (\log \text{Pow} < 1.0)$$

(F(i) : 構造上の補正係数)

### ・ イオン解離性物質

$$\log \text{BCF} = 0.50 \quad (\log \text{Kow} < 5.0)$$

$$\log \text{BCF} = 0.75 \quad (\log \text{Kow } 5.0 \text{ to } 6.0)$$

$$\log \text{BCF} = 1.75 \quad (\log \text{Kow } 6.0 \text{ to } 7.0)$$

$$\log \text{BCF} = 1.00 \quad (\log \text{Kow } 7.0 \text{ to } 9.0)$$

$$\log \text{BCF} = 0.50 \quad (\log \text{Kow} > 9.0)$$

## ③BIOWIN

BIOWIN には 6 種類のモデルがあるが、中でも BIOWIN5 および BIOWIN6 が信頼性が高いとされている。これらは、OECD テストガイドライン 301C 法の試験条件下における化学物質の分解性を予測するものである。OECD301 法は、化学物質と好気性微生物の混合体を添加した水溶液中において、生化学的学的酸素要求量 (BOD) が測定され、4 週間後の BOD 分解度が 60%以上となることが、良分解性の基準とされている。本モデルの予測は、この基準において良分解性となる確率が連続的な値として出力される。また、GHS でも BIOWIN5 および BIOWIN6 を用いている。以降に BIOWIN における推算値算出方法について紹介する。

i) BIOWIN5

BIOWIN5 は日本の MITI における線形予測モデルである。42 の部分構造および分子量を記述子とし、以下の式により算出される。

$$Y_j = a_0 + a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_n f_n + a_m MW + e_j$$

ここで、 $Y_j$  は化学物質 J が易分解性になる確率、 $f_n$  は化学物質 J における部分構造 n の数、 $a_0$  は切片、 $a_n$  は部分構造 n の回帰係数、MW は分子量、 $a_m$  は分子量の回帰係数、 $e_j$  は誤差項を差す。 $Y_j$  が 0.5 以上で易分解性、0.5 未満で難分解性と判定される。なお回帰係数は最小二乗法によって算出される。

ii) BIOWIN6

BIOWIN6 は日本の MITI における非線形予測モデルである。記述子は BIOWIN5 と同じであるが、回帰係数は最尤法によって算出される。最尤法とは一致性、有効性、充分性を満たす最適推定量を求める方法のことである。以下の式に算出方法を示す。

$$Y_j = \frac{\exp(a_0 + a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_n f_n + a_m MW)}{1 + \exp(a_0 + a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_n f_n + a_m MW)} \dots \dots (18)$$

なお BIOWIN5 および BIOWIN6 ともに、米国 EPA が新規化学物質審査に活用している。