

# 对埃科™ 醇衍生物进行评估的拟议分类方法，以满足《Safer Choice直接释放型表面活性剂标准》

## 执行摘要

Safer Choice直接释放型表面活性剂符合更高的环境标准，可反映其与水生生物直接接触的潜力。这些标准由EPA概述<sup>1</sup>。埃克森美孚对埃科™ 醇的乙氧基化衍生物进行了广泛的内部环境测试，以提供其环境特征的详细描述，并为这些产品的客户在诸多应用中提供支持。在没有测试数据的情况下，我们的环境毒理学专家开发了复杂的模型并采取证据权重策略，以预测这些物质的一系列环境特性（包括生物降解性和生态毒性危害）。

基于其环境特性，特定乙氧基化范围内的埃科醇基乙氧基化表面活性剂符合《EPA Safer Choice直接释放标准》。

根据建模、现有测试数据和成熟的构效关系，埃克森美孚提出以下乙氧基化衍生物（EO）符合EPA标准的结论。目前，Safer Choice计划正在审查拟议类别的可接受性：

含20EO至4EO埃科™ 8符合标准，EO含量下限并有可能降至1EO

含20EO至7EO埃科™ 9符合标准，EO含量下限并有可能降至3EO

含20EO至9EO埃科™ 10符合标准，EO含量下限并有可能降至5EO

含20EO至7EO埃科™ 11符合标准，EO含量下限并有可能降至6EO

含20EO至12EO埃科™ 13符合标准，EO含量下限并有可能降至11EO

值得注意的是，一种与埃科™ 13（醇类，C11-14-异构，C13-富集，乙氧基化CAS#78330-21-9）命名规则相关联的乙氧基化表面活性剂已被列入《更安全的化学成分清单》（SCIL）。

---

<sup>1</sup> <https://www.epa.gov/saferchoice/standard#directrelease>

## 支持埃科™ 醇乙氧基化衍生物符合当前《Safer Choice直接释放标准》的数据总览<sup>2</sup>

碳链长度的变化、乙氧基（EO）单元数量和支化程度的变化都会影响醇乙氧基化物（AEO）表面活性剂的性能和环境特性。能获得Safer Choice认证的理想分子应具有高降解性和低水生毒性。虽然我们无法获得所有同系物或AEO混合物的详尽数据集，但已开发的构效关系（SAR）可以准确地预测这些特性。（表1）。

表1 - 乙氧基化醇主要属性和环境特性的构效关系。

特性	模型	输出	参考
生物降解性	BioWIN v4.10 (BioWin 1-7, RBD预测)	快速生物降解性 (分类)	US EPA, 2020
	Catalogic v.5.11 (301F 动力学模型)	快速生物降解性 (定量) 初级半衰期 (水)	Dimitrov et al., 2011
水生毒性	目标脂质模型 (TLM)	L/EC50和ChV (鱼类、无脊椎动物、藻类)	Di Toro et al. 2000a,b; Bragin et al., 2019*
	ECOSAR v2.0	L/EC50和ChV (鱼类、无脊椎动物、藻类)	US EPA, 2020
生物累积性	BCFBAF (Arnot Gobas 上营养级BCF/BAF)	BCF和BAF (低、中、高营养级水生生物, 包括新陈代谢)	US EPA, 2020
	BCF回归	BCF (鱼类; 无新陈代谢)	

\*TLM专门针对醇乙氧基化物的应用。

将已知的构效关系与化学结构、机理及效应的现有数据和认知相结合，人们可以开发一种证据权重方法来填补数据空白，并就各种AEO产品的环境特性做出明智的决策。

<sup>2</sup>最终决定须经 EPA 批准

表2 - 埃科™ 醇乙氧基化物（1EO至20EO）的急性毒性特征

		Ethoxylation Level															
		1EO	2EO	3EO	4EO	5EO	6EO	7EO	8EO	9EO	10EO	11EO	12EO	13EO	14EO	->	20EO
埃科™	Branched alcohol ethoxylate																
	8 ✓																
	9 ✓																
	10 ✓									✓							
	11 ✓							✓									
	13 ✓			✓		✓	✓					✓					

  

Acute Aquatic Toxicity (ppm)			
≤1 ppm	>1 ≤10 ppm	>10 ≤100 ppm	>100 ppm

Modeled/Read across  Data ✓

一般来说，有机化学品的急性水生毒性和慢性水生毒性之间存在可预测的关系（例如，急性水生毒性较高的化学品，慢性水生毒性也会较高）。由于急性水生毒性数据更容易获得，因此Safer Choice 标准使用这些数据来筛选可能对水生生物有毒的化学品（参见 [Safer Choice 更安全成分总标准](#) 第5.9和6.8节）。按照 EPA 相关工作人员的口头指导，慢性数据并非绝对要求，通常，慢性毒性预计为急性毒性/10。根据这一规则可以预计，急性水生毒性 > 10 ppm的物质会具有 > 1ppm这一慢性毒性阈值。这一假设是相当保守的，因为针对中性有机化学品（ACR = 5.22）的急性与慢性比率（ACR）已经开展了大量研究，其中具体领域包括AEO母醇（Di Toro et al., 2000a,b; McGrath et al., 2009; Redman et al., 2012; Redman et al., 2017; McGrath et al., 2018）。最近的研究表明，这一结果可以用来保守地预测醇乙氧基化物（AEO）的慢性毒性（Bragin et al., 2019）。

针对各种物质的生物降解测试充分证实了我们的支链AEO的生物降解特性（Bragin et al., 2019）。

表3 - 埃科™ 醇乙氧基化物（1EO至20EO）的生物降解特性

		Ethoxylation Level															
		1EO	2EO	3EO	4EO	5EO	6EO	7EO	8EO	9EO	10EO	11EO	12EO	13EO	14EO	->	20EO
埃科™	Branched alcohol ethoxylate	8 ✓			✓		✓		✓		✓						
		9 ✓	✓		✓		✓		✓	✓							✓
		10 ✓			✓		✓		✓		✓						
		11 ✓			✓		✓		✓	✓		✓					
		13 ✓							✓	✓	✓			✓			

  

Biodegradability (OECD 301F)	
Readily Biodegradable	Readily Biodegradable 10d Window
Modeled/Read across	Data ✓

几种异构支链母醇（C10、12和13）的BCF数据（Camenzuli et al., 2019），以及异构支链 C10和C13醇和支链C11-3EO乙氧基化物的BMF数据（Gobas et al., 2020）已生成并显示这些物质的 BCF 和 BMF 数值非常低（母醇的5%脂质标准化BCF范围为12-77L/kg-ww，母醇和C11-3EO乙氧基化物的 BMF 数值范围为0.001-0.003），这与之前的研究结果相吻合——由此表明AEO在水生生物体内的生物累积潜力低且代谢速度快（Tolls et al., 2000 and Belanger et al., 2009）。此外，BCF QSAR 数据与醇乙氧基化物及其母醇的数据十分吻合，预测其生物累积潜力较低（Arnot & Gobas, 2003; Arnot & Gobas 2006）。虽然Safer Choice标准并未明确考虑BMF数据，但这一信息应被视为另一种更高层级的证据线索，可证实难溶性或高疏水性化合物具有较低的生物累积/生物富集潜力，尤其在饮食暴露途径可能被认为是重要的情况下（Gobas et al., 2020）。这些独立的证据线索有力地支持了AEO在水生环境中生物累积潜力较低的证据权重结论。

表4 - 埃科™ 醇乙氧基化物（1EO至20EO）的生物富集系数（BCF）/生物累积系数

		Ethoxylation Level																
		1EO	2EO	3EO	4EO	5EO	6EO	7EO	8EO	9EO	10EO	11EO	12EO	13EO	14EO	->	20EO	
埃科™	Branched alcohol ethoxylate																	
	8																	
	9																	
	10 ✓																	
	11			✓														
13 ✓																		

  

BCF/BAF			
>2000	>1000 ≤ 2000	>100 ≤ 1000	≤ 100

Modeled/Read across   Data ✓

(BAF)

综合这些信息，可以得出以下预测结果，从而满足EPA Safer Choice直接释放标准。

表4 - 预计符合Safer Choice直接释放标准的埃科™ 醇乙氧基化物范围及其置信度。



**SAFER CHOICE**  
Meets U.S. EPA Safer Product Standards  
[epa.gov/saferchoice](http://epa.gov/saferchoice)

		Ethoxylation Level																
		1EO	2EO	3EO	4EO	5EO	6EO	7EO	8EO	9EO	10EO	11EO	12EO	13EO	14EO	->	20EO	
埃科™	Branched alcohol ethoxylate																	
	8																	
	9																	
	10																	
	11																	
13																		

  

Meets EPA Safer Choice Direct Release Criteria		
Potential	Confident	High Confidence

1. No degradation products of concern are compounds with high acute or chronic aquatic toxicity (L/E/IC50 ≤ 10ppm or LOEC ≤ 1 ppm) and a slow rate of biodegradation (greater than 28 days).

©2024 埃克森美孚。埃克森美孚 (ExxonMobil), 埃克森美孚的徽标 (ExxonMobil logo) 及连接的“X”设计和在本文件中使用的的所有其他产品或服务名称, 除非另有标明, 否则均为埃克森美孚的商标。未经埃克森美孚的事先书面授权, 不得分发、展示、复印或改变本文件。使用者可在埃克森美孚授权的范围内, 分发、展示和/或复印本文件, 但必须毫无改动并保持其完整性, 包括所有的页眉、脚注、免责声明及其它信息。使用者不可将本文件全文或部份复制到任何网站。埃克森美孚不保证典型(或其它)数值。本文件包含的所有数据是基于代表性样品的分析, 而不是实际运送的产品。本文件所含信息仅是所指明的产品或材料未与任何其它产品或材料结合使用时的相关信息。我们的信息基于收集之日被认为可靠的数据, 但是, 我们并不明示或暗示地陈述、担保或以其它方式保证此信息或所描述产品、材料或工艺的适用性、适宜于某一特定用途、不侵犯专利权、适用性、准确性、可靠性或完整性。使用者对在其感兴趣的领域使用该材料、产品或工艺所做的一切决定负全部责任。我们明确声明将不对由于任何人使用或依赖本文件所含任何信息而导致的或与此相关的直接或间接遭受或者产生的任何损失、损害或伤害承担责任。本文件不应视作我们对任何非埃克森美孚产品或工艺的认可, 并且我们明确否认任何相反的含意。“我们”、“我们的”、“埃克森美孚产品方案业务”或“埃克森美孚”等词语均为方便而使用, 可包括埃克森美孚产品方案业务、埃克森美孚公司, 或由它们直接或间接控制的任何关联公司中的一家或者多家。

## 参考文献:

- Arnot, Jon A., and Frank APC Gobas."A generic QSAR for assessing the bioaccumulation potential of organic chemicals in aquatic food webs." *QSAR & Combinatorial Science* 22.3 (2003):337-345.
- Arnot, Jon A., and Frank APC Gobas."A review of bioconcentration factor (BCF) and bioaccumulation factor (BAF) assessments for organic chemicals in aquatic organisms." *Environmental Reviews* 14.4 (2006):257-297.
- Bragin, Gail E., et al."Biodegradation and Ecotoxicity of Branched Alcohol Ethoxylates:Application of the Target Lipid Model and Implications for Environmental Classification." *Journal of Surfactants and Detergents* 23.2 (2020):383-403.
- Camenzuli, L., et al."Bioconcentration factors for hydrocarbons and petrochemicals:Understanding processes, uncertainty and predictive model performance." *Chemosphere* 226 (2019):472-482.
- Dimitrov, S., et al."Simulation of chemical metabolism for fate and hazard assessment.II CATALOGIC simulation of abiotic and microbial degradation." *SAR and QSAR in Environmental Research* 22.7-8 (2011):719-755.
- Di Toro, Dominic M., Joy A. McGrath, and David J. Hansen."Technical basis for narcotic chemicals and polycyclic aromatic hydrocarbon criteria.I. Water and tissue." *Environmental Toxicology and Chemistry:An International Journal* 19.8 (2000):1951-1970.
- Di Toro, Dominic M., and Joy A. McGrath."Technical basis for narcotic chemicals and polycyclic aromatic hydrocarbon criteria.II.Mixtures and sediments." *Environmental Toxicology and Chemistry:An International Journal* 19.8 (2000):1971-1982.
- Gobas, Frank APC, et al."A Toxicokinetic Framework and Analysis Tool for Interpreting Organisation for Economic Co-operation and Development Guideline 305 Dietary Bioaccumulation Tests." *Environmental Toxicology and Chemistry* 39.1 (2020):171-188.
- Maurer, Laura L., and Ming H. Kung."Mammalian Toxicity Testing of Semilinear and Branched Alcohol Ethoxylates." *Journal of Surfactants and Detergents* 23.5 (2020):921-935.
- McGrath, Joy A., and Dominic M. Di Toro."Validation of the target lipid model for toxicity assessment of residual petroleum constituents: monocyclic and polycyclic aromatic hydrocarbons." *Environmental Toxicology and Chemistry:An International Journal* 28.6 (2009):1130-1148.
- McGrath, Joy A., et al."Re-evaluation of target lipid model-derived HC5 predictions for hydrocarbons." *Environmental toxicology and chemistry* 37.6 (2018):1579-1593.
- Redman, Aaron D., et al."PETROTOX:An aquatic toxicity model for petroleum substances." *Environmental Toxicology and Chemistry* 31.11 (2012):2498-2506.
- Redman, Aaron D., et al."A re-evaluation of PETROTOX for predicting acute and chronic toxicity of petroleum substances." *Environmental toxicology and chemistry* 36.8 (2017):2245-2252.
- US EPA.2020.Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.11.United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.