

[1] 1-オクタノール

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

物質名： 1-オクタノール

(別の呼称： *n*-オクタノール、オクチルアルコール、オクタン-1-オール)

CAS 番号： 111-87-5

化審法官報告示整理番号： 2-217(アルカノール(C=5~38))

化管法政令番号： 1-58

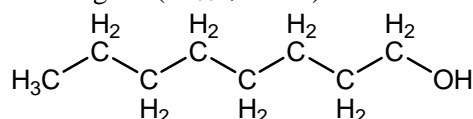
RTECS 番号： RH6550000

分子式： C₈H₁₈O

分子量： 130.23

換算係数： 1 ppm = 5.32 mg/m³ (気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色の液体でバラのような芳香がある¹⁾。

融点	-14.8°C ²⁾ 、-16~-17°C ³⁾ 、-15.5°C ⁴⁾ 、-17°C ⁵⁾
沸点	195.16°C(760 mmHg) ²⁾ 、194~195°C ³⁾ 、195.1°C ⁴⁾ 、195°C ⁵⁾
密度	0.8262 g/cm ³ (25°C) ²⁾
蒸気圧	0.0794 mmHg (=10.6 Pa) (25°C) ⁴⁾
分配係数(1-オクタノール/水)(log Kow)	3.00 ⁶⁾ 、3.07 ²⁾ 、2.8 ⁵⁾ 、3.15 ⁵⁾
解離定数(pKa)	
水溶性(水溶解度)	540 mg/L (25°C) ⁴⁾ 、300 mg/L (20°C) ⁵⁾ 、495 mg/L (25°C) ⁵⁾ 、596 mg/L (25°C) ⁵⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性
<u>好氣的分解</u> (難分解性ではないと判断される物質 ⁷⁾)
分解率：BOD 89%、TOC 99%、GC100% (試験期間：4週間、被験物質濃度：100 mg/L、活性汚泥濃度：30 mg/L) ⁸⁾
化学分解性
<u>OH ラジカルとの反応性</u> (大気中)
反応速度定数：14.4×10 ⁻¹² cm ³ /(分子・sec) (測定値) ⁹⁾
半減期：4.5~45 時間 (OH ラジカル濃度を 3×10 ⁶ ~3×10 ⁵ 分子/cm ³ ¹⁰⁾ と仮定して計算)
<u>加水分解性</u>
水域において加水分解はそれほど重要ではないと予想される ¹¹⁾ 。

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF) : 41 (BCFWIN¹²)により計算)

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc) : 28 (PCKOCWIN¹³)により計算)

(4) 製造輸入量等及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の化学物質排出把握管理促進法（化管法）における製造・輸入量区分は 100,000t である。

合成オクタノールとしての生産量¹⁴、オクタノール（オクチルアルコール）及びその異性体の合計値としての輸出量¹⁵、2-エチルヘキシルアルコール（2-エチルヘキサン-1-オール）を除いたオクタノール（オクチルアルコール）及びその異性体の合計値としての輸入量¹⁵の推移を表 1.1 に示す。

表 1.1 生産量・輸出量・輸入量の推移

平成（年）	7	8	9	10	11
生産量 (t) ^{a),b)}	321,634	331,166	320,589	285,308	314,819
輸出量 (t) ^{c),d)}	27,114	36,657	23,951	41,778	55,378
輸入量 (t) ^{c),e)}	3,304	2,384	2,828	1,546	2,043
平成（年）	12	13	14	15	16
生産量 (t) ^{a),b)}	278,162	261,712	301,948	305,376	306,589
輸出量 (t) ^{c),d)}	39,669	53,222	81,150	78,450	78,580
輸入量 (t) ^{c),e)}	2,505	2,650	3,810	3,160	4,588

注：a) 生産量は同一事業所内での自家消費分を含む値を示す

b) 合成オクタノールとしての値を示す

c) 普通貿易統計[少額貨物(1品目が20万円以下)、見本品等を除く]品別国別表より集計

d) オクタノール（オクチルアルコール）及びその異性体の合計値を示す

e) 2-エチルヘキシルアルコール(2-エチルヘキサン-1-オール)を除いたオクタノール（オクチルアルコール）及びその異性体の合計値を示す

② 用途

本物質の主な用途は、香料（ローズ系の調合香料、精油、オクチルアルデヒド、 α -ヘキシルシンナミックアルデヒド）、化粧品、有機合成品の溶剤、可塑剤 DOP の原料および安定剤原料、界面活性剤、合成ゴムの重合あるいは加硫剤（オクチルメルカプタン）、金属の抽出剤（トリオクチルアミン）とされている¹⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

本物質は化学物質排出把握管理促進法第一種指定化学物質（政令番号:58）に指定されている。また、本物質は水環境保全に向けた取組のための要調査項目に選定されている。

2. ばく露評価

生態リスクの初期評価のため、水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに基本的には水生生物の生息が可能な環境を保持すべき公共用水域における化学物質のばく露を評価することとし、データの信頼性を確認した上で安全側に立った評価の観点から原則として最大濃度により評価を行っている。

(1) 環境中への排出量

本物質は化管法の第一種指定化学物質である。同法に基づき公表された、平成16年度の届出排出量¹⁾、届出外排出量対象業種・非対象業種・家庭・移動体²⁾から集計した排出量等を表2.1に示す。なお、届出外排出量非対象業種・家庭・移動体の推計はなされていなかった。

表 2.1 化管法に基づく排出量及び移動量（PRTR データ）の集計結果（平成16年度）

	届出					届出外（国による推計）				総排出量（kg/年）			
	排出量（kg/年）				移動量（kg/年）	排出量（kg/年）				届出排出量	届出外排出量	合計	
	大気	公共用水域	土壌	埋立		対象業種	非対象業種	家庭	移動体				
全排出・移動量	2,406	37	0	0	9	59,611	68	-	-	-	2,442	68	2,510

業種別届出量（割合）

業種	大気	公共用水域	土壌	埋立	移動量	割合
電気機械器具製造業	1,400	0	0	0	0	52 (0.1%)
化学工業	996	24	0	0	9	59,558 (99.9%)
飲料・たばこ・飼料製造業	10	13	0	0	0	0
倉庫業	0	0	0	0	0	1 (0.002%)

総排出量の構成比(%)	
届出	97%
届出外	3%

本物質の平成16年度における環境中への総排出量は、2.5tとなり、そのうち届出排出量は2.4tで全体の97%であった。届出排出量のうち2.4tが大気へ、0.0037tが公共用水域へ排出されるとしており、大気への排出量が多い。その他に下水道への移動量が0.009t、廃棄物への移動量が60tであった。届出排出量の主な排出源は、大気への排出が多い業種は電気機械器具製造業(58%)、化学工業(41%)であり、公共用水域への排出の多い業種は化学工業(64%)、飲料・たばこ・飼料製造業(36%)であった。

表2.1に示したようにPRTRデータでは、届出排出量は媒体別に報告されているが、届出外排出量の推定は媒体別には行われていないため、届出外排出量対象業種の媒体別配分は届出排出量の割合をもとに行った。届出排出量と届出外排出量を媒体別に合計したものを表2.2に示す。環境中への推定排出量は、大気が2.5t(全体の99%)、水域が0.038t(同1.5%)であった。

表 2.2 環境中への推定排出量

媒体	推定排出量(kg)
大気	2,473
水域	38
土壌	0

(2) 媒体別分配割合の予測

本物質の環境中の媒体別分配割合を、表 2.1 に示した環境中への推定排出量と下水道への移動量を基に、USES3.0 をベースに日本固有のパラメータを組み込んだ Mackay-Type Level III 多媒体モデル³⁾を用いて予測した。予測の対象地域は、平成 16 年度に環境中及び大気への推定排出量が最大であった秋田県（大気への推定排出量 1.4t）と公共用水域への推定排出量が最大であった茨城県（大気への推定排出量 0.11t、公共用水域への推定排出量 0.023t）とした。予測結果を表 2.3 に示す。

表 2.3 媒体別分配割合の予測結果

媒体	分配割合(%)		
	上段：排出量が最大の媒体、下段：予測の対象地域		
	環境中	大気	公共用水域
	秋田県	秋田県	茨城県
大気	82.1	82.1	15.5
水域	9.7	9.7	81.7
土壌	8.1	8.1	1.6
底質	0.1	0.1	1.2

注：数値は環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したもの

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の水質及び底質中の濃度について情報の整理を行った。媒体ごとにデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.4 に示す。

表 2.4 各媒体中の存在状況

媒体	幾何 平均値	算術 平均値	最小値	最大値	検出 下限値	検出率	調査 地域	測定年	文献	
公共用水域・淡水	μg/L	0.019	0.044	0.004	0.54	0.002	47/47	全国	2002	4)
		0.0019	0.0036	<0.002	0.020	0.002	4/10	全国	2002～2003	5)
公共用水域・海水	μg/L	0.003	0.004	<0.002	0.007	0.002	2/3	全国	2002	4)
		0.0037	0.0067	<0.002	0.017	0.002	4/7	全国	2002	5)
底質（公共用水域・淡水）	μg/g	0.0013	0.0037	<0.00024	0.011	0.00024	6/9	全国	2002	5)
底質（公共用水域・海水）	μg/g	0.0020	0.0059	<0.00024	0.019	0.00024	5/7	全国	2002	5)

(4) 水生生物に対するばく露の推定（水質に係る予測環境中濃度：PEC）

1-オクタノールの水生生物に対するばく露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.5 のように整理した。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度（PEC）を設定すると、公共用水域の淡水域では 0.54 μg/L 程度、同海水域では 0.017 μg/L 程度となった。

表 2.5 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	0.019 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2002)	0.54 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2002)
海 水	0.0037 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2002)	0.017 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2002)

注：1) () 内の数値は測定年を示す

2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む

3. 生態リスクの初期評価

水生生物の生態リスクに関する初期評価を行った。

(1) 水生生物に対する毒性値の概要

本物質の水生生物に対する毒性値に関する知見を収集し、その信頼性及び採用可能性を確認したものを生物群(藻類、甲殻類、魚類及びその他)ごとに整理すると表3.1のとおりとなった。

表 3.1 水生生物に対する毒性値の概要

生物群	急性	慢性	毒性値 [µg/L]	生物名	生物分類	エンドポイント ／影響内容	ばく露期間 [日]	試験の 信頼性	採用の 可能性	文献 No.
藻類			2,800	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₁₀ GRO(AUG)	2	B	B	1)-2997
			4,200	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₁₀ GRO(RATE)	2	B	B	1)-2997
			6,300*	<i>Scenedesmus quadricauda</i>	緑藻類	TT POP	7	D	C	1)-5303
	○		6,500	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	2	B	B	1)-2997
	○		14,000	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)	2	B	B	1)-2997
甲殻類		○	1,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	B* ⁵	B* ⁵	1)-847
	○		4,170	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	ニセネコゼミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B	A	1)-18991
	○		20,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	1	C	C	1)-707
	○		26,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	1	B	B	1)-847
	○		58,000	<i>Nitocra spinipes</i>	ソコミジンコ目	LC ₅₀ MOR	4	B	B	1)-5185
魚類			1,750* ²	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノー	NOEC GRO	7 (4日齢)	A	C* ²	1)-16510
			2,000* ²	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノー	NOEC GRO	7 (7日齢)	A	C* ²	1)-16510
	○		13,000	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノー	LC ₅₀ MOR	4 (試験5* ⁴)	A	A	1)-3217
	○		13,100	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノー	LC ₅₀ MOR	4 (試験6* ⁴)	A	A	1)-3217
	○		13,300	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノー	LC ₅₀ MOR	4	A	A	1)-14128
	○		13,400	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノー	LC ₅₀ MOR	4	A	A	1)-10183
	○		13,500	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノー	LC ₅₀ MOR	4	A	A	1)-15823
	○		15,000-17,000	<i>Alburnus alburnus</i>	コイ科	LC ₅₀ MOR	4	B	B	1)-5185
	○		16,500	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	2 (30°C)	C	C	1)-12497
	○		21,000	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	2	C	C	1)-20097
	○		21,200	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	2 (20°C)	C	C	1)-12497
○		24,000	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	2 (10°C)	C	C	1)-12497	
その他	○		9,300* ³	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	EC ₅₀ POP (OD測定)	46時間 (液量50mL)	A	C* ³	1)-12482

生物群	急性	慢性	毒性値 [μg/L]	生物名	生物分類	エンドポイント ／影響内容	ばく露期間 [日]	試験の 信頼性	採用の 可能性	文献 No.
	○		9,430	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	EC ₅₀ POP (細胞数測定)	46時間 (液量 50mL)	A	A	1)-12482
	○		9,570	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	EC ₅₀ GENT (細胞数測定)	46時間 (液量 50mL)	A	A	1)-12482
	○		15,800	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	EC ₅₀ GENT (OD 測定)	46時間 (液量 2mL)	B	C	1)-12482
	○		41,160	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IGC ₅₀ GRO	2	A	A	1)-3262
	○		41,200	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IGC ₅₀ GRO	2	A	A	1)-8080
			44,000	<i>Entosiphon sulcatum</i>	ユーグレナ目	TT POP	3	B	C	1)-5303

毒性値 (太字) : PNEC 導出の際に参照した知見として本文で言及したもの

毒性値 (太字下線) : PNEC 導出の根拠として採用されたもの

試験の信頼性 : 本初期評価における信頼性ランク

A : 試験は信頼できる、B : 試験は条件付きで信頼できる、C : 試験の信頼性は低い、D : 信頼性の判定不可

採用の可能性 : PNEC 導出への採用の可能性ランク

A : 毒性値は採用できる、B : 毒性値は条件付きで採用できる、C : 毒性値は採用できない

ばく露期間

() 内 : 同一文献における試験条件の違い

エンドポイント

EC₁₀ (10% Effective Concentration) : 10% 影響濃度、EC₅₀ (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、

LC₅₀ (Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度、

TT (Toxicity Threshold) : 増殖阻害閾値、IGC₅₀ (50% Growth Inhibitory Concentration) : 半数成長阻害濃度

影響内容

GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、

REP (Reproduction) : 繁殖、再生産、POP (Population Changes) : 個体群変化、GENT (Generation time) : 世代交代時間

() 内 : 同一文献における試験条件または毒性値算出方法

AUG (Area Under Growth Curve) : 生長曲線下の面積により求める方法 (面積法)

RATE : 生長速度より求める方法 (速度法)

- *1 原則として速度法から求めた値を採用しているため、PNEC 算出の根拠としては用いない
- *2 3 試験の算術平均値。ばく露期間が7日間であり、急性、慢性試験に分類できないため PNEC 導出の根拠には採用しない
- *3 分光光度計により細胞密度を測定し算出した毒性値。ここでは直接細胞数を計測し算出した値を採用した
- *4 同一文献において2回試験が行われている
- *5 繁殖試験のエサに (生クロレラでなく) 「テトラミン+活性汚泥」を用いており、水温も 25°Cで行っているため、試験の信頼性、採用の可能性ともに「B」とした。

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて最も小さい毒性値を予測無影響濃度 (PNEC) 導出のために採用した。その知見の概要は以下のとおりである。

1) 藻類

Kühn と Pattard ¹⁾⁻²⁹⁹⁷ は、ドイツ工業規格 (DIN 38 412, Part 1, 1982) の改良法に準拠し、緑藻類 *Desmodesmus subspicatus* (旧 *Scenedesmus subspicatus*) の生長阻害試験を実施した。試験は密閉系で行われ、設定試験濃度の範囲は 1.6~200 mg/L (公比 2) であった。速度法による 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は、設定濃度に基づき 14,000 μg/L であった。なお面積法による毒性値はこれよりも小さかったが、本初期評価では原則として生長速度から求めた値を採用している。

2) 甲殻類

Rose ら ¹⁾⁻¹⁸⁹⁹¹ は米国 EPA の試験法 (EPA/600/4-90/027F, 1993) に基づく標準法 (Warne, 1996)

に準拠し、ニセネコゼミジンコ *Ceriodaphnia dubia* の急性毒性試験を実施した。試験は密閉系・止水式で行われた。試験溶液の調製にはアセトンが用いられた。遊泳阻害における 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は初期実測濃度に基づき 4,170 µg/L であった。

また Kühn ら¹⁾⁻⁸⁴⁷ は、ドイツ FEA 提案の暫定方法(1984)に準拠し、オオミジンコ *Daphnia magna* の繁殖試験を行った。試験は半止水式 (週 3 回換水) で行われ、設定試験濃度の範囲は 0.4~50 mg/L (公比 2) であった。試験用水には、ドイツ工業規格 (DIN, 1982) に従った人工調製水が用いられた。被験物質の実測濃度は設定濃度の 80%以下に減少していたため、毒性値は最低実測濃度に基づき算出された。21 日間無影響濃度 (NOEC) は 1,000 µg/L であった。本試験では毒性が低くなる可能性のある活性汚泥を餌として与えており、試験水温度も 25°C であったなど通常の試験条件と異なるため、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした。

3) 魚類

Geiger ら¹⁾⁻³²¹⁷ は、ファットヘッドミノー *Pimephales promelas* の急性毒性試験を流水式 (18 倍容量換水/日) で行った。設定試験濃度は 0、3.41、5.24、8.06、12.4、19.1 mg/L であった。試験用水にはスペリオル湖水または脱塩素水道水 (硬度約 45.9 mg/L as CaCO₃) が用いられた。実測濃度 (試験開始時から終了時の平均値) に基づく 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) は、13,000 µg/L であった。

4) その他

Larsen¹⁾⁻¹²⁴⁸² はテトラヒメナ *Tetrahymena pyriformis* の生育阻害試験を実施した。試験は止水式で行われ、設定試験濃度の範囲は 0~100%阻害 (少なくとも 50%阻害) 濃度であった。試験溶液の調製には培地として SM 培地が、助剤としてジメチルスルホキシド (DMSO) が 0.1% (V/V) 未満量用いられた。細胞数計測にはコールターカウンターを利用した。46 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は 9,430 µg/L であった。なお、分光光度計により細胞密度を測定し算出した毒性値はこれよりも小さかったが、ここでは直接細胞数を計測し算出した値を採用した。

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、上記本文で示した毒性値に情報量に応じたアセスメント係数を適用し予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値

藻類	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	生長阻害 ; 48 時間 EC ₅₀	14,000 µg/L
甲殻類	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	遊泳阻害 ; 48 時間 EC ₅₀	4,170 µg/L
魚類	<i>Pimephales promelas</i>	96 時間 LC ₅₀	13,000 µg/L
その他	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	個体群変化 ; 46 時間 EC ₅₀	9,430 µg/L

アセスメント係数 : 100 [3 生物群 (藻類、甲殻類、魚類) 及びその他の生物について信頼できる知見が得られたため]

これらの毒性値のうち、その他の生物を除いた最も小さい値 (甲殻類の 4,170 µg/L) をアセスメント係数 100 で除することにより、急性毒性値に基づく PNEC 値 42 µg/L が得られた。

慢性毒性値

甲殻類 *Daphnia magna* 繁殖阻害；21 日間 NOEC 1,000 µg/L

アセスメント係数：100 [1 生物群（甲殻類）の信頼できる知見が得られたため]

甲殻類の慢性毒性値（1,000 µg/L）をアセスメント係数 100 で除することにより、慢性毒性値に基づく PNEC 値 10 µg/L が得られた。

本物質の PNEC としては甲殻類の慢性毒性値から得られた 10 µg/L を採用する。

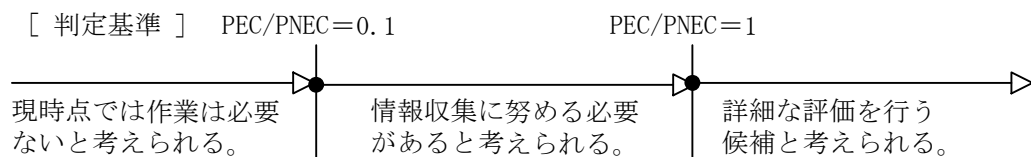
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

水質	平均濃度	最大濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	0.019 µg/L程度 (2002)	0.54 µg/L程度 (2002)	10 µg/L	0.05
公共用水域・海水	0.0037 µg/L程度 (2002)	0.017 µg/L程度 (2002)		0.002

注：1) 水質中濃度の () 内の数値は測定年を示す

2) 公共用水域・淡水域は、河川河口域を含む



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度で見ると淡水域で 0.019 µg/L 程度、海水域で 0.0037 µg/L 程度であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) は、淡水域では 0.54 µg/L 程度、海水域では 0.017 µg/L 程度であった。予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域では 0.05、海水域では 0.002 となるため、現時点では作業の必要はないと考えられた。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学工業日報社(2006) : 14906 の化学商品.
- 2) Lide, D.R. ed. (2005): CRC Handbook of Chemistry and Physics, CD-ROM Version 2005, Boca Raton, CRC Press. (CD-ROM).
- 3) O'Neil, M.J. ed. (2001): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc. (CD-ROM).
- 4) Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 210.
- 5) Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).
- 6) Hansch, C., Leo, A., and Hoekman, D. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington D.C., ACS Professional Reference Book: 49.
- 7) 経済産業公報 (2002.11.8) .
- 8) (独)製品評価技術基盤機構 : 既存化学物質安全性点検データ,
(http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html, 2005.10.14 現在)
- 9) Atkinson, R (1994). [U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1. 91.].
- 10) Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv.
- 11) Lyman, W.J., Reehl, W.F., and Rosenblatt, D.H. (1990): Handbook of chemical property estimation methods: environmental behavior of organic compounds. American Chemical Society, Washington, D.C., USA. [Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>), 2005.10.14 現在].
- 12) U.S. Environmental Protection Agency, BCFWIN™ v.2.15.
- 13) U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.1.66.
- 14) 通商産業省 (1996) : 平成 7 年度化学工業統計年報、通商産業省(1997) : 平成 8 年度化学工業統計年報、通商産業省 (1998) : 平成 9 年度化学工業統計年報、通商産業省(1999) : 平成 10 年度化学工業統計年報、通商産業省(2000) : 平成 11 年度化学工業統計年報、通商産業省(2000) : 平成 11 年度化学工業統計年報、経済産業省(2001) : 平成 12 年度化学工業統計年報、経済産業省(2002) : 平成 13 年度化学工業統計年報、経済産業省(2003) : 平成 14 年度化学工業統計年報、経済産業省(2004) : 平成 15 年度化学工業統計年報、経済産業省(2005) : 平成 16 年度化学工業統計年報.
- 15) 財務省 : 貿易統計, (<http://www.customs.go.jp/toukei/info/> , 2005.9.6 現在).

(2) ばく露評価

- 1) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課(2006) : 平成 16 年度特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律(化学物質排出把握管理促進法) 第 11 条に基づき開示する個別事業所データ.

- 2) (独)製品評価技術基盤機構：届出外排出量の推計値の対象化学物質別集計結果 算出事項
(対象業種・非対象業種・家庭・移動体) 別の集計 表 3-2 都道府県別,
(<http://www.prtr.nite.go.jp/prtr/csv/2004a/2004a3-2.csv>).
- 3) (独)国立環境研究所 (2004)：平成 15 年度新規化学物質挙動追跡調査報告書.
- 4) 環境省水環境部水環境管理課 (2003)：平成 13 年度要調査項目測定結果.
- 5) 環境省環境保健部環境安全課 (2004)：平成 15 年度版化学物質と環境.

(3) 生態リスクの初期評価

1)- : U.S.EPA 「AQUIRE」

- 707: Bringmann, G., and R. Kühn (1982): Results of Toxic Action of Water Pollutants on *Daphnia magna* Straus Tested by an Improved Standardized Procedure. *Z.Wasser-Abwasser-Forsch.* 15(1):1-6.
- 847 : Kühn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989) : Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to *Daphnia magna* in the 21 Day Reproduction Test. *Water Res.* 23(4):501-510.
- 2997 : Kühn, R., and M. Pattard (1990) : Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to Green Algae (*Scenedesmus subspicatus*) in the Cell Multiplication Inhibition Test. *Water Res.* 24(1):31-38.
- 3217 : Geiger, D.L., L.T. Brooke, and D.J. Call (1990) : Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*), Vol. 5. Center for Lake Superior Environmental Studies, University of Wisconsin, Superior, WI:332.
- 3262 : Schultz, T.W., L.M. Arnold, T.S. Wilke, and M.P. Moulton (1990) : Relationships of Quantitative Structure-Activity for Normal Aliphatic Alcohols. *Ecotoxicol.Environ.Saf.* 19(3):243-253.
- 5185 : Linden, E., B.E. Bengtsson, O. Svanberg, and G. Sundstrom (1979) : The Acute Toxicity of 78 Chemicals and Pesticide Formulations Against Two Brackish Water Organisms, the Bleak (*Alburnus alburnus*) and the Harpacticoid. *Chemosphere* 8(11/12):843-851.
- 5303 : Bringmann, G., and R. Kühn (1980) : Comparison of the Toxicity Thresholds of Water Pollutants to Bacteria, Algae, and Protozoa in the Cell Multiplication Inhibition Test. *Water Res.* 14(3):231-241.
- 8080 : Schultz, T.W., and M. Tichy (1993) : Structure-Toxicity Relationships for Unsaturated Alcohols to *Tetrahymena pyriformis*: C5 and C6 Analogs and Primary Propargylic Alcohols. *Bull.Environ.Contam.Toxicol.* 51(5):681-688.
- 10183: Veith, G.D., D.J. Call, and L.T. Brooke (1983): Estimating the Acute Toxicity of Narcotic Industrial Chemicals to Fathead Minnows. In: W.E.Bishop, R.D.Cardwell, and B.B.Heidolph (Eds.), *Aquatic Toxicology and Hazard Assessment*, 6th Symposium, ASTM STP 802, Philadelphia, PA :90-97.
- 12482 : Larsen, J. (1996) : Pilot Ringtest on Five Test Substances Employing Optimized Test Protocols with the Protozoan *Tetrahymena pyriformis*. In: W.Pauli and S.Berger (Eds.), *Rep.No.UBA-FB 96-039, Proc.International Workshop on a Protozoan Test Protocol with Tetrahymena in Aquatic Toxicity Testing*, Umweltbundesamt:67-104.

- 12497 : Tsuji, S., Y. Tonogai, Y. Ito, and S. Kanoh (1986) : The Influence of Rearing Temperatures on the Toxicity of Various Environmental Pollutants for Killifish (*Oryzias latipes*).
J.Hyg.Chem./Eisei Kagaku 32(1):46-53.
- 14128 : Broderius, S., and M. Kahl (1985) : Acute Toxicity of Organic Chemical Mixtures to the Fathead Minnow. *Aquat.Toxicol.*6:302-322.
- 15823: Veith, G.D., D.J. Call, and L.T. Brooke (1983): Structure-Toxicity Relationships for the Fathead Minnow, *Pimephales promelas*: Narcotic Industrial Chemicals. *Can.J.Fish.Aquat.Sci.* 40(6):743-748.
- 16510: Pickering, Q.H., J.M. Lazorchak, and K.L. Winks (1996): Subchronic Sensitivity of One-, Four-, and Seven-Day-Old Fathead Minnow (*Pimephales promelas*) Larvae to Five Toxicants. *Environ.Toxicol.Chem.* 15(3):353-359.
- 18991 : Rose, R.M., M.S.J. Warne, and R.P. Lim (1998) : Quantitative Structure-Activity Relationships and Volume Fraction Analysis for Nonpolar Narcotic Chemicals to the Australian Cladoceran *Ceriodaphnia*. *Arch.Environ.Contam.Toxicol.* 34(3):248-252.
- 20097 : Carlson, R.W., S.P. Bradbury, R.A. Drummond, and D.E. Hammermeister (1998) : Neurological Effects on Startle Response and Escape from Predation by Medaka Exposed to Organic Chemicals. *Aquat.Toxicol.* 43(1):51-68.