

(案)

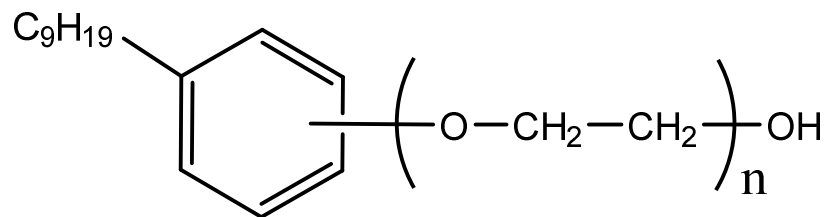
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価

物理化学的性状等の詳細資料

α - (ノニルフェニル) - ω - ヒドロキシポリ(オキシエチレン) (別名ポリ(オキシエチレン) = ノニルフェニルエーテル)

優先評価化学物質通し番号 86



平成 30 年 1 月

経済産業省

目 次

1		
2		
3	1 評価対象物質の性状.....	1
4	1-1 評価対象物質の設定.....	1
5	1-2 NPE（親化合物）.....	8
6	1-3 NPE2、NPE1、NP（変化物）.....	16
7	2 【付属資料】.....	19
8	2-1 物理化学的性状等一覧.....	19
9	2-2 その他.....	21
10		
11		

1 1 評価対象物質の性状

2 本章では、モデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデー
3 タを示す。

5 1-1 評価対象物質の設定

6 優先通し番号 86「 α - (ノニルフェニル) - ω - ヒドロキシポリ (オキシエチレン) (別名
7 ポリ (オキシエチレン) = ノニルフェニルエーテル)」(以下、「NPE」という。)は、エチレ
8 ンオキシド (EO) の平均付加モル数、ノニル基の炭素鎖構造及びノニル基の芳香環への置
9 換位置の組み合わせにより、様々な構造を有する。また、NPE は環境中で生分解により、よ
10 り短いエチレンオキシド鎖を有する NPE やノニルフェノールに分解される。そのため評価
11 対象物質等について実態調査や検討を行い、親化合物と変化物のそれぞれについて評価対
12 象物質とリスク評価の方針を設定した。親化合物の評価対象物質とリスク評価方針を表 1
13 - 1 に、変化物のそれを表 1 - 2 示す。変化物の評価対象物質は NPE2、NPE1、NP とした
14 (平均 EO の付加モル数 n の NPE を NPE n と表記、NP はノニルフェノール)。

16 表 1 - 1 NPE の親化合物の評価対象物質・試験対象物質及びリスク評価の方針

設定事項	内訳・補足	化学構造上の項目		
		EO 付加モル数	ノニル基の構造	ノニル基の置換位置
優先評価化学物質の指定単位		1 以上で特定なし	特定なし	特定なし
評価対象物質	親化合物 「ポリ (オキシエチレン) = ノニルフェニルエーテル」	3 以上で平均付加モル数 9~10	特定しない	<i>o-p</i> -異性体 又は特定しない
試験対象物質 (評価対象物質に最も関連性 Relevance がある既知見データの試験等の対象物質)	物理化学的性状等	9 または 10 (実測がない場合には 9 で推計)	直鎖/分岐区別なし (実測がない場合には分岐で推計)	<i>p</i> -、 <i>o</i> -または特定なし (実測がない場合には <i>p</i> 位で推計)
	有害性情報	3 以上について収集し、信頼性があり、最も毒性値が小さいデータを選定	直鎖/分岐区別なし	特定なし
リスク評価の方針	有害性評価	<ul style="list-style-type: none"> ・ 3 以上について収集し、信頼性があり最も毒性値が小さいデータをキーデータとして選定 ・ 傍証として信頼性が低いデータも利用し、EO 付加モル数による毒性傾向を把握 		

設定事項	化学構造上の項目			
	内訳・補足	EO 付加モル数	ノニル基の構造	ノニル基の置換位置
			・ 評価結果に応じて付加モル数別環境中での存在状況を加味した PNEC の補正などを検討	
	暴露評価	シミュレーション	物化性状等は上記で、排出量については PRTR 排出量を使用するため区別なし	
		環境モニタリング	3～15 の付加モル数別	区別なし（要調査等）
	リスク評価	シミュレーション	評価対象物質の環境中濃度、有害性評価値と想定して PEC/PNEC 値を推計	
環境モニタリング		・ 3～15 の付加モル数別の濃度を合算して有害性評価値と比較 ・ リスクが懸念された地点については、付加モル数別の PEC/PNEC 推計も検討		

1

2

表 1 - 2 NPE の変化物の評価対象物質・試験対象物質及びリスク評価の方針

設定事項	化学構造上の項目			
	内訳・補足	EO 付加モル数	ノニル基の構造	ノニル基の置換位置
優先評価化学物質の指定単位		1 以上で特定なし	特定なし	特定なし
評価対象物質	変化物 「NPE2,NPE1,NP」	0,1,2	特定しない	特定しない
試験対象物質 (評価対象物質に最も関連性 Relevance がある既知見データの試験等の対象物質)	物理化学的性状等	0,1,2 (暴露シミュレーションを行わないので、底生生物の有害性評価用に logP,Koc データのみ収集)	特定しない	特定しない
	有害性情報	0,1,2	直鎖/分岐区別なし	特定なし
リスク評価の方針	有害性評価		・ PNEC は NPE (NPE2 と NPE1) で 1 つ、NP で 1 つの合計 2 つ導出	
	暴露評価	シミュレーション	実施しない	
		環境モニタリング	1,2 のデータ	区別なし（要調査等）
		NP のデータ	分岐 (生活環境項目等)	p 位のみ (生活環境項目等)

設定事項	化学構造上の項目				
	内訳・補足		EO 付加モル数	ノニル基の構造	ノニル基の置換位置
リスク評価	シミュレーション		実施しない		
	環境モニタリング		<ul style="list-style-type: none"> ・ NPE2 と NPE1 : 付加モル数 1,2 のモニタリングデータを合算した PEC と PNEC を比較 ・ NP : NP のモニタリングデータ (PEC) と PNEC を比較 		

1
2 以上のように評価対象物質を決めるにあたって調査・検討した内容を以降で説明する。

3

4 **NPE (親化合物) の評価対象物質について**

5 水域への全国推計排出量 (ただし長期使用製品の排出量は除く) が多かった用途 (13-a、
6 25-l、45-b、20-f、25-p、12-a、14-b、14-a) について届出があった物質の構造について届出者
7 に確認したところ、概要は表 1 - 3 のとおりであった。

8

9 **表 1 - 3 届出者への NPE の構造に係る製造数量等届出者への調査結果概要**

構造上の調査項目	結果概要 (水域排出量への寄与率)
エチレンオキシド (EO) の付加モル数	<ul style="list-style-type: none"> ・ 平均付加モル数 9 の合計 : 50% ・ 10 : 39% ・ 40 : 0.28%
ノニル基の炭素鎖構造 (直鎖 / 分岐)	<ul style="list-style-type: none"> ・ 分岐 71% ・ 直鎖 24% ・ 不明 5%
ノニル基の芳香環への置換位置 (o-,p-,m-異性体)	<ul style="list-style-type: none"> ・ o,p-体を主 64% ・ 不明 29% ・ p 体のみ 7%

10

11 上表について詳細を次に示す。

12

13 **エチレンオキシド (EO) の平均付加モル数 n について**

14 NPE の水域への全排出量^{1,2} に対する寄与率を EO 平均付加モル数別に集計した結果を表
15 1 - 4 に示す。

16 NPE は EO 付加モル数が 18 以上で分子量が 1000 超となることから、ここでは EO 平均
17 付加モル数が 17 以下を「低分子」、18 以上を「高分子」と書き分けることとする。

18

19

¹ 各用途において、水溶解度区分 1-100mg/L の排出係数を用いて算出。

² 本実態調査で照会を行った出荷物全体のことを示す。

1 表 1 - 4 全排出量に対する寄与率の EO 平均付加モル数別集計

EO 平均付加モル数 n	分子量	水域への全排出量に対する寄与率 1	
3	352.52	0.01%	97.35%
4	396.57	3.74%	
5	440.63	0.36%	
6	484.68	0.51%	
7	528.73	1.37%	
8	572.79	0.03%	
9	616.84	50.16%	
10	660.89	38.62%	
11	704.95	0.81%	
12	749.00	1.25%	
13	793.05	0.16%	
15	881.16	0.08%	
16	925.22	0.23%	
17	969.27	0.03%	2.65%
18	1013.32	- (18 ~ 39: 0%) 2	
40	1982.50	0.28%	
51	2467.09	0.04%	

- 2
- 3 1. EO 平均付加モル数 n の水域への全排出量に対する寄与率であり、各 n の分布範囲について
- 4 考慮していない。
- 5 2. EO 平均付加モル数が 18 ~ 39 の NPE が 0% であるが、EO 平均付加モル数 n=17 までのもの
- 6 の分布範囲に 18 ~ 25 のものが含まれる。
- 7 例：n=10：EO 付加モル数の分布範囲 1 ~ 18
- 8 n=11：EO 付加モル数の分布範囲 5 ~ 20
- 9 n=12：EO 付加モル数の分布範囲 5 ~ 21
- 10 n=13：EO 付加モル数の分布範囲 5 ~ 22
- 11 n=15：EO 付加モル数の分布範囲 6 ~ 22
- 12 n=17：EO 付加モル数の分布範囲 6 ~ 25

13

14 取扱い実態調査の結果から、低分子の水域への全排出量に対する寄与率が 90% 以上であ

15 ることを鑑みて、評価対象物質の候補からは「高分子」を検討対象外とする。

16 低分子の中では、取扱い実績から、EO 平均付加モル数 9 の物質が全排出量に対し約

17 42% を占め、EO 平均付加モル数 10 は 32% であった。この 2 つが全体の 73% を占めた。

18

19 ノニル基の炭素鎖構造(分岐鎖 / 直鎖)について

20 NPE の水域への全排出量を取扱い実態調査の出荷物別にみると、最も排出量が多い製品

21 のノニル基は直鎖構造であったが(全排出量に対して 23.1% の寄与)、全体的にみるとノ

22 ニル基が分岐構造のものが多く、全排出量の 71.1% を占めた(全排出量に対して、構造不

23 明 4.85%、直鎖 24.1%)。

24

1 ノニル基の芳香環への置換位置

2 *o*-, *p*-体を主とするものが全排出量に対して 63.5%、*p* 体のみのもものが 6.6%、不明のもの
3 が 28.9%であった。*o*-, *p*-体を主とするもの、あるいは *p* 体のみのももので全排出量の 71.1%
4 を占めた。

5

6 水溶解度、logPow、Koc 及び分解性の 4 項目について ~ の構造上の違いによる性状へ
7 の影響を調べたところ、 の EO 付加モル数が支配的であることが分かった。そのため暴露
8 評価の面からは は特定せず、EO 付加モル数が評価対象物質の設定を行えばよいと考え
9 られた。

10 水生生物のリスク評価を行うための評価対象物質は、難分解性であることから親化合物
11 の中の排出量への寄与が大きい EO 付加モル数ものもものが妥当と考えられる。また、水生
12 生物のリスク評価に用いる水中濃度には溶存態濃度を用いるため、安全側にリスク推計す
13 るには Koc が小さいほうがよいと考えられる。

14

15 以上のように調査・検討した結果、NPE の親化合物についてリスク評価を行うための評
16 価対象物質・試験対象物質及びリスク評価の方針は前述の表 1 - 1 のように決められた。

17

18

1 **変化物の評価対象物質について**

2 既往情報の調査では、ノニルフェノールおよびノニルフェノールモノエトキシレート
 3 (NPE1)、ノニルフェノールジエトキシレート(NPE2)は、複数の評価に共通して評価対象と
 4 なっている。NPE1 および NPE2 の毒性について情報は少ないが、カナダの評価書では NPE1
 5 および NPE2 の混合物および NPE2 の毒性情報が記載されている。オーストラリアの評価書
 6 には NPE1 及び NPE2 の毒性情報が記載されており、また、それらのカルボン酸誘導体につ
 7 いて毒性値の記載はないが、“毒性は NP よりも 100~200 倍小さい”という定性的な記述があ
 8 った。

9 以上の国内外の既知見情報の調査結果を踏まえ、NPE の親化合物についてリスク評価を
 10 行うための評価対象物質・試験対象物質及びリスク評価の方針は前述の表 1 - 2 のように
 11 決められた。

12
 13 評価対象物質(親化合物)の主成分構造等を表 1 - 5、評価対象物質(変化物)の構造等
 14 を表 1 - 6、表 1 - 7、表 1 - 8 に示す。

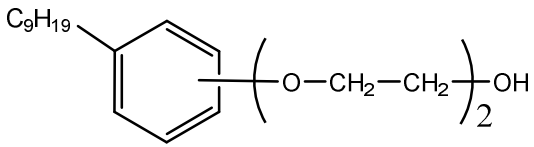
15
 16 **表 1 - 5 評価対象物質(親化合物:NPE)の主成分構造等**

	<p> $\text{C}_9\text{H}_{19}-\text{C}_6\text{H}_4-(\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2)_9-\text{OH}$ 又は $\text{C}_9\text{H}_{19}-\text{C}_6\text{H}_4-(\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2)_{10}-\text{OH}$ </p>
評価対象物質名称	α - (ノニルフェニル) - ω - ヒドロキシポリ(オキシエチレン) (別名ポリ(オキシエチレン) = ノニルフェニルエーテル) ただし、エチレンオキシドの平均付加モル数は 3 以上で 9 ~ 10
分子式	$\text{C}_{33}\text{H}_{60}\text{O}_{10}$ 又は $\text{C}_{35}\text{H}_{64}\text{O}_{11}$
CAS 登録番号	26571-11-9 (n = 9) 27177-08-8 (n = 10)など

17
 18
 19
 20
 21

1

表 1 - 6 評価対象物質(変化物 1:NPE2)の構造等

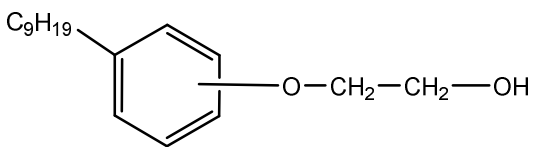
	
評価対象物質名称	ノニルフェノールジエトキシレート
分子式	C ₁₉ H ₃₂ O ₃
CAS 登録番号	20427-84-3 など

2

3

4

表 1 - 7 評価対象物質(変化物 2:NPE1)の構造等

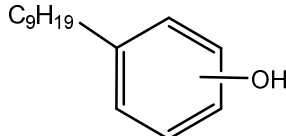
	
評価対象物質名称	ノニルフェノールモノエトキシレート
分子式	C ₁₇ H ₂₈ O ₂
CAS 登録番号	104-35-8 など

5

6

7

表 1 - 8 評価対象物質(変化物 3:NP)の構造等

	
評価対象物質名称	ノニルフェノール
分子式	C ₁₅ H ₂₄ O
CAS 登録番号	25154-52-3 など

8

9

10

1 1-2 NPE (親化合物)

2 1-2-1 物理化学的性状及び濃縮性

3 下表にモデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、表中の下線
4 部は、評価 において精査した結果、評価 から変更した値を示している。

5

6 表 1-9 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ(親化合物(NPE))

項目	単位	採用値	詳細	評価 I で用いた値(参考)
分子量	-	616.81	NPE9 の値	264.41
融点		2.8 ^{1),9),10)}	測定値か推定値か不明な値	2.8 ¹⁾
沸点		(634) ²⁾	MPBPVP による推計値	369.64 ²⁾
蒸気圧	Pa	<u>6.7×10⁻¹³</u> ²⁾	MPBPVP による推計値	99 ³⁾
水に対する溶解度	mg/L	<u>(1×10⁶)</u> ^{5),10)}	水に可溶とみなす ただし臨界ミセル濃度は 49.6 mg/L ¹³⁾	1.53×10 ⁵ ³⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	-	<u>(3.2)</u> ²⁾	KOWWIN による推計値	3.7 ³⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>4.0×10⁻¹⁷</u> ²⁾	HENRYWIN による推計値	2.48×10 ⁻⁴ ⁴⁾
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>6100</u> ¹¹⁾	河川の底質 7 地点における測定値に基づき算出	6.1 ^{1),4),5)}
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>11.4</u> ¹²⁾	濃縮度試験における測定値	1.4 ⁶⁾
生物蓄積係数(BMF)	-	1 ⁷⁾	logPow と BCF から設定	1 ⁷⁾
解離定数(pKa)	-	- ⁵⁾	解離性の基を有さない物質	- ⁸⁾

- 7 1) MOE (2006) 7) MHLW, METI, MOE (2014)
8 2) EPI Suite (2012) 8) 評価 I においては解離定数は考慮しない
9 3) ECHA 9) Canada (2001)
10 4) HSDB 10) AIST (2004)
11 5) NITE (2005a) 11) Urano (1984)
12 6) MITI (1982) 12) MITI (1979)
13 13) Australia (2017)

14 括弧内はモデルを動かすための参考値であることを示す。

15

16 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

17 なお、評価 では CAS RN 9016-45-9 の物質の情報のデータを用いていた。この CAS RN
18 の物質のエチレンオキシド (EO) の付加モル数の規定はない。

19 また、評価 において推計値を用いる場合は、1-1 で記載したように NPE9 のノニル基
20 が分岐した *p*-体を対象とする。その場合、「平成 29 年度第 1 回化審法リスク評価等検討会」
21 (平成 29 年 8 月 31 日) の資料に記載されている次の 6 種類の *p*-体を対象とした。

22

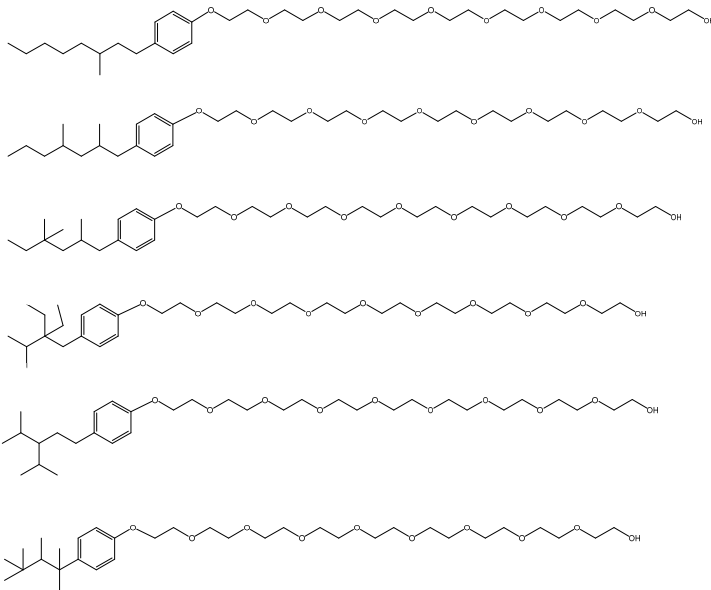
23

24

25

26

27



1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23

融点

評価 で採用した値 (2.8)は、MOE (2006) に記載された値 (NPE9) であるが、測定値であるか不明である。この値は Canada (2001)に記載のもので AIST (2004) でも引用されている。また、HSDB には NPE9 の流動点が 2.8 という記載があった。EO 付加モル数の記載があるもので信頼性の定まった情報源において測定値は見つからなかったため、評価 においてもこの値 (2.8)を用いる。

沸点

評価 で採用した値 (369.64)は便宜的に決めた代表構造 (NPE1) について MPBPVP (v1.43) を用いた推計値である。EO 付加モル数の記載があるもので信頼性の定まった情報源において測定値は見つからなかった。MPBPVP (v1.43) を用いた NPE9 の推計値は 622 ~ 645 (対象とした 6 種類の *p*-体の推計値の範囲。以下同様。) であり、評価 においては、算術平均値 (634)を用いる。ただし、通常の有機化合物は存在できない高温であるため参考値の扱いとする。

蒸気圧

評価 で採用した値 (99 Pa) は、ECHA に記載された 25 での測定値 (140 Pa) を 20 に補正したものであるが EO 付加モル数の記載がなかった。EO 付加モル数の記載があるもので信頼性の定まった情報源において測定値は見つからなかった。MPBPVP (v1.43) を用いた NPE9 の推計値は 2.5×10^{-13} Pa ~ 1.4×10^{-12} Pa であり、評価 においては、MPBPVP の算術平均値 (6.7×10^{-13} Pa)を用いる。

1
2 水に対する溶解度

3 評価 で採用した値 (1.53×10^5 mg/L) は、ECHA に記載された 20 で測定された測定値で
4 あるが EO 付加モル数の記載がなかった。HSDB や MITI (1982) には NPE10 の測定値かど
5 うか不明な値 (1000 mg/L) の記載がある。NITE (2005a) には、NPE9.5 は水に可溶という
6 情報と、EO 付加モル数の増加により水溶解性は増加し、付加モル数が 7 以上で水に可溶、
7 また、アルキル鎖の分岐により水溶解性は増加するという記載があり (AIST (2004) でも引
8 用) 他の信頼性の定まった情報源にも同様の記載があるため、評価 においては、水に対
9 する溶解度を 1×10^6 mg/L (参考値) とする。ただし、Australia (2017) によれば NPE10 の臨界ミ
10 セル濃度 (CMC) の測定値が 49.6 mg/L であることに注意が必要である。

11
12 logPow

13 評価 で採用した値 (3.7) は、ECHA に記載された OECD TG117 による測定値 (EO 付加
14 モル数記載なし) である。MOE (2006) と Canada (2001) に NPE9 の値 (3.59) の記載があり、
15 元文献である Ahel (1993) を確認したところ測定値ではなく付加モル数又は水溶解度と
16 logPow との回帰式を基にした推計値とみられたが、この値は見つからなかった。EO 付加モ
17 ル数の記載があるもので信頼性の定まった情報源において測定値は見つからなかった。
18 KOWWIN (v.1.68) を用いた NPE9 の推計値は 3.1 ~ 3.3 であり、評価 においては、KOWWIN
19 の算術平均値 (3.2) を用いる。ただし、NPE は界面活性剤であることから正しく推計ができ
20 ていない可能性があるため参考値の扱いとする。(なお、KOWWIN (v.1.68) のヘルプ 6.2.3 に
21 よれば現在のところモデルドメインの明確な定義はないとのこと。)

22
23 ヘンリー係数

24 評価 で採用した値 (2.48×10^{-4} Pa \cdot m³/mol) は、HSDB に記載された測定値であるが、NP
25 の値であった。EO 付加モル数の記載があるもので信頼性の定まった情報源において測定値
26 は見つからなかった。HENRYWIN (v.3.30) を用いた NPE9 の 20 での推計値は 4.0×10^{-17} Pa \cdot
27 m³/mol であり、評価 においてはこの値 (4.0×10^{-17} Pa \cdot m³/mol) を用いる。

28
29 Koc

30 評価 で採用した値 (6.1 L/kg) は、MOE (2006)、NITE (2005a)、HSDB に記載された値で
31 ある。MOE (2006)、NITE (2005a) では NPE6 の値として記載しているが、これは元文献であ
32 る Urano (1984) を確認すると NPE10 の値であり、引用間違いと考えられた。Urano (1984)
33 によれば日本の河川 (小鮎川、水沢川、相模川、平瀬川) の 7 つの底質を測定し Freundlich
34 の吸着等温式に基づいて Koc を求めている。ただし論文中の Koc の値 (6.1) の単位は L/g
35 であるため、単位換算すると 6100 L/kg となる。

36 HSDB には NPE9 の Koc の推計値 (4300 L/kg) の記載があったが、他に信頼性の定まった

1 情報源において測定値は見つからなかった。評価 においては NPE10 の値として、Urano
2 (1984) の値 (6100 L/kg) を用いる。

3 4 BCF

5 評価 で採用した値 (1.4 L/kg) は、MITI (1982) に記載された平均重合度 30 の NPE を用
6 いた濃縮倍率である 0.2 L/kg 以下 (6 週間、試験濃度:2 mg/L)、1.4 L/kg 以下 (6 週間、試験
7 濃度:0.2 mg/L) の最大値である。他に MITI (1979) には NPE10 を用いた濃縮倍率として 9.09
8 ~ 16.0 L/kg (6 週間、試験濃度:1.0 mg/L)、(7.6) ~ (12 L/kg) (6 週間、試験濃度:0.1 mg/L、()の
9 値は参考値) の値の記載があった。評価 では NPE10 を用いた参考値を除いた試験の後半
10 3 回の濃縮倍率の算術平均値(11.4 L/kg) を用いる。なお、試験濃度はいずれも 水に対する
11 溶解度で前述した臨界ミセル濃度未満である。

12 13 BMF

14 評価 で採用した値は、logPow (3.7) 及び BCF (1.4 L/kg) から化審法における優先評価化
15 学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従って
16 設定したものである。BMF の測定値は得られなかったため、評価 においては新たに評価
17 で選定した logPow (3.2) 及び BCF (11.4 L/kg) から設定した値 (1) を用いる。

18 19 解離定数

20 評価 においては解離を考慮しないため、参考値は設定されていない。NITE (2005a) に
21 は解離基はないとの記載があり、評価 においても本物質は解離性を考慮しないこととす
22 る。

1 1-2-2 分解性

2 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

3
4 **表 1 - 10 分解に係るデータのまとめ(親化合物(NPE))**

項目		半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	0.10
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
水中	水中における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	6.1
		加水分解	-
		光分解	NA
土壌	土壌における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	6.1
		加水分解	-
底質	底質における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	25
		加水分解	-

5 1) EPI Suite(2012)

6 2) Kveštak (1995)

7 3) HSDB

8 NA:情報が得られなかったことを示す

9
10 上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、「総括分解半減期」とは、分解の
11 機序を区別しない環境媒体ごとのトータルの半減期のことを示す。精査では物理化学的性状
12 と同様に基本的に平均 EO 付加モル数が 9、10 であるものを対象にした。

13
14 **大気**

15 大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期につい
16 ても、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

17 **-1 OH ラジカルとの反応の半減期**

18 大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかった
19 ため、AOPWIN (v1.92) により推計された $1.5 \times 10^{-10} \sim 1.6 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ のうち、最小
20 値である $1.5 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ を半減期算出に採用する。大気中 OH ラジカル濃度を技術
21 ガイドンスの $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 0.10 日と算出される。評価 ではこ
22 の値 (0.10 日) を用いる。

1 水中
 2 水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解と加水分解の機序別
 3 の半減期に関する情報が得られた。

4 -1 生分解の半減期

5 Kveštak (1995) (HSDB、AIST (2004)で引用) は、EO 範囲 1~18 (平均 EO 付加モル数 10)
 6 の NPE を使い、静的ダイヤウェイ試験法に従い水中の生分解試験を実施している。被験物
 7 質濃度 0.1 mg/L 又は 1 mg/L でクロアチアのクルカ川 (Krka River) の河口から微生物を含ん
 8 だ汽水層 (水深 0.5m) と塩水層 (水深 6m) を用いて 30 日間試験し、トータルの NPE 濃度
 9 を、逆相 HPLC で分離し、蛍光分光光度計を用い、励起光波長 230 nm、蛍光波長 300 nm で
 10 検出することによって分析した。その結果、半減期を下表のように冬季 (13) で 23 日~
 11 69 日、夏季 (22.5) で 2.5 日~35 日と推計している。

初期濃度 (mg/L)	微生物の採 取地点	塩分濃度 (%)	温度 ()	誘導期 (日)	一次分解速度 定数 (1/日)	半減期 (1/日)
1	汽水層 0.5m	8	13	7	0.02	35
	汽水層 0.5m	8.5	18	4	0.03	23
	汽水層 0.5m	32	20	<1	0.17	4
	汽水層 0.5m	24	22.5	<1	0.17	4
0.1	汽水層 0.5m	8	13	3	0.03	23
	汽水層 0.5m	8.5	18	5	0.07	10
	汽水層 0.5m	24	22.5	<1	0.28	2.5
1	塩水層 6m	38	13	7	0.01	69
	塩水層 6m	38	18	13	0.02	35
	塩水層 6m	38	22.5	3	0.02	35
0.1	塩水層 6m	38	13	3	0.02	35
	塩水層 6m	38	18	5	0.03	23
	塩水層 6m	38	22.5	<1	0.05	14

13 汽水層、塩水層は brackish water layer、saline water layer の訳

14

15 Yoshimura (1986) (HSDB、AIST (2004)で引用) は、平均 EO 付加モル数 9 の NPE の生分解
 16 性を調査した。被験物質、川崎市の矢作川の底質をそれぞれ濃度 20 mg/L、3000 mg/L と
 17 なるように試験溶液に混ぜ、攪拌状態または攪拌なし状態での生分解性試験を 30 日間実施し、
 18 HPLC—比色法 (コバルト—チオシアネート法) で分析した。結果、10 日以内に約 98 % が分
 19 解した。また、汽水を使用したりバーダイヤウェイ試験において、39 %、90 %、92 % 及び
 20 94 % の分解がそれぞれ 4、5、8 及び 10~16 日間の試験後に認められた。

21

22 Urano (1985) (HSDB で引用) は、平均 EO 付加モル数 10 の NPE を使い、水中の生分解試
 23 験を実施している。被験物質濃度 3、10、30、100 mg/L で、活性汚泥濃度を被験物質濃度の
 24 1/3 として下水処理場の活性汚泥を用い、MITI () 法に類似した方法によって 20 で 14 日
 25 間試験を行った結果、被験物質濃度 3、10、30、100 mg/L に対して BOD 分解度 57 %、42 %、

1 40%、25%であった。

2
3 なお、MITI(1974)において化審法の試験方法に従って、平均EO付加モル数9.5、被験物
4 質濃度100mg/L、活性汚泥濃度30mg/Lで14日間試験を行った結果、BOD分解度、UV分
5 解度、TOC分解度、LC分解度はそれぞれ0%、6.8%、9.0%、5.2%であった。更に、MITI
6 (1975)において平均EO付加モル数9.5、被験物質濃度30mg/L、活性汚泥濃度30mg/Lで
7 21日間試験を行った結果、BOD分解度、UV分解度、TOC分解度はそれぞれ0%、0%、
8 14.3%であった。

9
10 以上の得られた情報のうち、Kveštak(1995)は励起光波長、検出光波長の値からベンゼン
11 環があるノニルフェノール基を検出していると考えられるため、EO数が異なる全てのNPE
12 が消失することに対する半減期を求めていると考えられる。モデル推計では主に河川(表層
13 水)の濃度推計を行うことから、Kveštak(1995)に記載された汽水層(0.5m)の値を選ぶと
14 分解速度の範囲は0.02(1/日)~0.28(1/日)であり、アレニウスプロットを行って20の値を
15 算出すると0.11(1/日)となり、半減期は6.1日となる。評価ではこの値(6.1日)を用いる。

16 なお、AIST(2009)には文献から得られた半減期をもとに、NPE_n(EO付加モル数は特に
17 規定していない)及びNPの分解速度求めたところ、分解速度は0.014(1/日)~1.0(1/日)の
18 範囲に収まっていたとし、算術平均値の0.15(1/日)(半減期4.7日)を水系モデルの分解速度
19 パラメータの参考にしたと記載されている。

20 -2 加水分解の半減期

21 HSDBには、環境条件下で加水分解する官能基がないため環境中で加水分解を受けるとは
22 考えられていないと記載されており、加水分解は考慮しない。

23 24 土壌

25 土壌中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関す
26 る情報も得られなかった。

27 -1 生分解の半減期

28 半減期に関するデータは得られなかったため、評価においては技術ガイダンスに従っ
29 て、土壌中での生分解半減期を水中の生分解半減期の6.1日とする。

30 -2 加水分解の半減期

31 水中での加水分解と同様に土壌中での加水分解は考慮しない。

32 33 底質

34 底質中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関す
35 る情報も得られなかった。

36 -1 生分解の半減期

- 1 半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での生分解半減期は、技術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期の4倍である25日とする。
- 2
- 3 -2 加水分解の半減期
- 4 水中での加水分解と同様に底質中での加水分解は考慮しない。
- 5
- 6

1 1-3 NPE2、NPE1、NP（変化物）

2 「平成 29 年度化審法リスク評価等検討会」（第 1 回 平成 29 年 8 月 31 日、第 2 回 平
3 成 29 年 11 月 20 日、第 3 回平成 29 年 12 月 22 日）において変化物の暴露評価の方針は次
4 のように取りまとめられた。

5
6 変化物の暴露評価に関しては、既存の知見で NPE から NP への変換率は数%程度とされ
7 ているため、変化物の環境中濃度を親化合物から全量変化物になるとして推計することは
8 極端な過大評価になると考えられる。また、親化合物から変化物への分解速度に関するデー
9 タも限られることからモデル推計を行うことは困難と考えられる。以上のことと、EO 付加
10 モル数 1 又は 2 及び NP の環境モニタリング情報が得られることから、暴露評価、リスク推
11 計には環境モニタリング情報を用いて行うこととする。

12
13 上記のように変化物は環境モニタリング情報を用いた暴露評価を行うため、モデル推計
14 のための物理化学的性状等の収集は行わない。しかし、変化物の底生生物の評価の実施を判
15 断するために logPow が必要となり、logPow が 3 以上の場合には平衡分配法による有害性評
16 価値算出のために Koc が必要となる。そこで logPow と Koc を収集し精査した。

17
18 1-3-1 ノニルフェノールジエトキシレート(NPE2)の logPow と Koc

19
20 下表に底生生物の評価に採用した NPE2 の logPow と Koc を示す。

21
22 **表 1 - 11 底生生物の評価に採用した logPow と Koc のまとめ(NPE2)**

項目	単位	採用値	詳細	評価 I で用いた値(参考)
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	-	4.21	20.5 での実測値 ¹⁾	-
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	640	推計値 ²⁾	-

23 1) Ahel (1993)

24 2) EPI Suite (2012)

25 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

26 logPow

27 Canada (2001) には NP の値が記載されているが、その元文献である Ahel (1993) には
28 OECD TG 107 のフラスコ振とう法により測定した NPE2 の 20.5 での測定値 (4.21) が記載
29 されている。評価 においてはこの値 (4.21) を用いる。なお、NPE は界面活性剤であるた
30 め、OECD TG107 を適用できない。しかし元文献では、NPE2 について、親水性部分である
31 EO 付加モル数が少ないため親油性化合物であるとし、OECD TG107 を適用できると見なし
32 ている。

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32

Koc

EO付加モル数の記載があるもので信頼性の定まった情報源において測定値は見つからなかった。KOCWIN (v2.00) を用いた NPE2 の推計値は 640 L/kg (Log Kow Estimation Method ; logPow = 4.21 とする) であった。評価 において、この値 (640 L/kg) を用いる。

1-3-2 ノニルフェノールモノエトキシレート(NPE1)の logPow と Koc

下表に底生生物の評価に採用した NPE1 の logPow と Koc を示す。

表 1 - 12 底生生物の評価に採用した logPow と Koc のまとめ(NPE1)

項目	単位	採用値	詳細	評価 I で用いた値(参考)
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	-	4.17	20.5 での実測値 ¹⁾	-
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	750	推計値 ²⁾	-

1) Ahel (1993)

2) EPI Suite (2012)

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

logPow

Canada (2001) には NP の値が記載されているが、その元文献である Ahel (1993) には OECD TG 107 のフラスコ振とう法により測定した NPE1 の 20.5 での測定値が記載されている。評価 においてはこの値 (4.17) を用いる。なお、NPE は界面活性剤であるため、OECD TG107 を適用できない。しかし元文献では、NPE1 について、親水性部分である EO 付加モル数が少ないため親油性化合物であるとし、OECD TG107 を適用できると見なしている。

Koc

EO付加モル数の記載があるもので信頼性の定まった情報源において測定値は見つからなかった。KOCWIN (v2.00) を用いた NPE1 の推計値は 750 L/kg (Log Kow Estimation Method ; logPow = 4.17 とする) であった。評価 においては、この値 (750 L/kg) を用いる。

1-3-3 ノニルフェノール (NP) の logPow と Koc

下表に底生生物の評価に採用した NP の logPow と Koc を示す。

1 表 1 - 13 底生生物の評価に採用した logPow と Koc のまとめ (NP)

項目	単位	採用値	詳細	評価 I で用いた値(参考)
1-オクタールと水との間の分配係数(logPow)	-	5.28	3つの値の算術平均値 ¹⁾⁻¹⁰⁾	-
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	1.0×10 ⁴	推計値 ¹¹⁾	-

- 2 1) SIDS (2001) 7) Itokawa (1989)
 3 2) Ahel (1993) 8) PhysProp
 4 3) Canada (2001) 9) HSDB
 5 4) AIST (2004) 10) ECHA
 6 5) Mackay (2006) 11) EPI Suite (2012)
 7 6) NITE (2005b)

8

9 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

10 logPow

11 SIDS (2001) には、Ahel (1993) が OECD TG 107 のフラスコ振とう法により測定した NP
 12 の 20.5 での測定値 (4.48) が記載されており、Canada (2001)、AIST (2004)、Mackay (2006)
 13 にもこの値が採用されている。

14 一方、NITE (2005b) には、Itokawa (1989) が HPLC 法により測定した NP の 40 での測定
 15 値 (5.76 (*o* 体、*p* 体)、5.61 (*m* 体)) が記載されており、PhysProp、HSDB、ECHA、AIST (2004)、
 16 Mackay (2006) にもこれらの値が採用されている。

17 評価 においてはこれらの3つの値の算術平均値 (5.28) を用いる。

18 Koc

19 SIDS (2001) には、USEPA TSCA 環境運命試験ガイドラインに沿って実測した測定値
 20 (22,000-490,000 L/kg) が記載されているが、試験容器への吸着のために測定値が高すぎる可
 21 能性があると述べている。

22 KOCWIN (v2.00) を用いた NP の推計値は 1.0×10⁴ L/kg (Log Kow Estimation Method ;
 23 logPow = 5.28 とする) であった。評価 においては、この値 (1.0×10⁴ L/kg) を用いる。

24

1 2 【付属資料】

2 2 - 1 物理化学的性状等一覽

3 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

4

5 出典)

6 Ahel (1993): Marijan Ahel. and Walter Giger (1993) Partitioning of alkylphenols and alkylphenol
7 polyethoxylates between water and organic solvents, Chemosphere, Vol. 26, No. 8, pp. 1471-1478.

8 AIST (2004): 産業技術総合研究所, 詳細リスク評価書, ノニルフェノール. 2004.

9 Australia (2017): Environment Tier II Assessment for Nonylphenol Ethoxylates and their Sulfate and
10 Phosphate Esters (25 July 2017).

11 Canada (2001): PRIORITY SUBSTANCES LIST ASSESSMENT REPORT, Nonylphenol and its
12 Ethoxylates. 2001.

13 ECHA: Information on Chemicals – Registered substances.

14 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>, (2017-10-24 閱
15 覧).

16 EPI Suite (2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.

17 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.

18 <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2017-10-24 閱覧).

19 Itokawa (1989): Itokawa, H., Totsuka, N., Hakahara, K., Meazuru, M., Takeya, K., Konda, M.,
20 Inamatsu, M., Morita, H (1989) A quantitative structureactivity relationship for antitumor activity of
21 long-chain phenols from Ginkgo biloba L, Chem. Pharm. Bull. 36, 1619–1621.

22 Kveštak (1995): R. Kveštak, M. Ahel (1995) Biotransformation of nonylphenol polyethoxylate
23 surfactants by estuarine mixed bacterial cultures, Archives of Environmental Contamination and
24 Toxicology, 29 (4), 551-556.

25 Mackay (2006): Mackay, D., Shiu, W. Y., Ma, K. C., & Lee, S. C. Handbook of physical-chemical
26 properties and environmental fate for organic chemicals. 2nd ed., CRC press, 2006.

27 MHLW, METI, MOE(2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイ
28 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

- 1 MITI (1974): ポリオキシエチレンアルキルフェニルエーテル (A : n (平均付加モル数) =
2 9.5、B : n (平均付加モル数) = 40) の分解度試験報告書. 既存化学物質点検, 1974.
- 3 MITI (1975): ポリオキシエチレンアルキルフェニルエーテル (試料 No.K-49) の分解度試験
4 報告書. 既存化学物質点検, 1975.
- 5 MITI (1979): ポリオキシエチレンアルキル(ノニル)フェニルエーテル (試料 No.K-49A) の
6 濃縮度試験報告書. 既存化学物質点検, 1982.
- 7 MITI (1982): ポリオキシエチレンアルキルフェニルエーテル (ポリ (平均重合度 30) オキ
8 シエチレンアルキル (C=9) フェニルエーテル) (試料 No.K-49B) の濃縮度試験報告書. 既存
9 化学物質点検, 1982.
- 10 MOE (2006): 化学物質の健康影響に関する暫定的有害性評価シート DB - 42, ポリ (オキシ
11 エチレン) = ノニルフェニルエーテル. 2006.
- 12 NITE (2005a): 化学物質の初期リスク評価書, ポリ(オキシエチレン)ノニルフェニルエーテ
13 ル. Ver. 1.0, No. 96, 2005.
- 14 NITE (2005b): 化学物質の初期リスク評価書, ノニルフェノール. Ver. 1.0, No. 1, 2005.
- 15 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-10-24 閲覧).
- 16 SIDS (2001): SIDS INITIAL ASSESSMENT PROFILE, Phenol, 4-nonyl-, branched and
17 Nonylphenol. 2001
- 18 Urano (1984): K. Urano, M. Saito, C. Murata (1984) Adsorption of surfactants on sediments,
19 Chemosphere, 13 (2), 293-300.
- 20 Urano (1985): K. Urano, M. Saito (1985) Biodegradability of surfactants and inhibition of
21 surfactants to biodegradation of other pollutants, Chemosphere, 14 (9), 1333-1342.
- 22 Yoshimura (1986): K. Yoshimura (1986) Biodegradation and fish toxicity of nonionic surfactants,
23 Journal of the American Oil Chemists' Society, 63 (12), 1590-1596.
- 24

- 1 2-2 その他
- 2 特になし。