

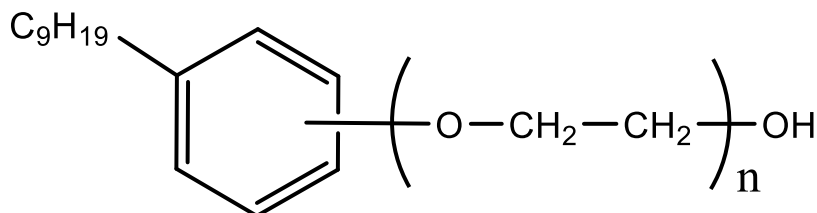
1
2
3
4 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

5 生態影響に係る評価Ⅱ

6 物理化学的性状等の詳細資料

7
8
9 α -(ノニルフェニル)- ω -ヒドロキシポリ(オ
10 キシエチレン)(別名ポリ(オキシエチレン)ニ
11 ニルフェニルエーテル)

12
13 優先評価化学物質通し番号 86



21 平成30年1月

22
23 経済産業省

24
25

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		<ul style="list-style-type: none"> ・ 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（ <i>o</i> -, <i>p</i> -, <i>m</i> -異性体）	<ul style="list-style-type: none"> ・ <i>o</i>,<i>p</i>-体を主 64% ・ 不明 29% ・ <i>p</i>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%	
18	1013.32	- (18 ~ 39: 0%) 2	2.65%
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

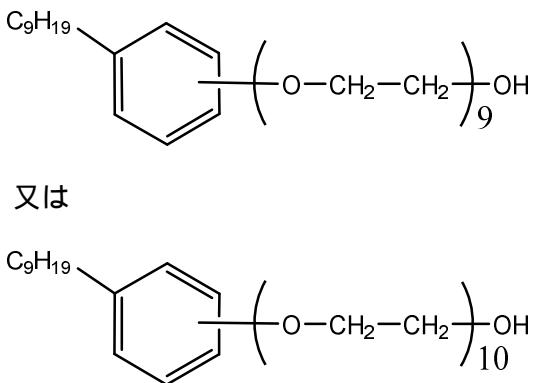
1 **変化物の評価対象物質について**

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。

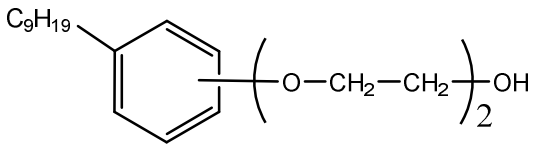
15
 16 **表 1 - 5 評価対象物質(親化合物:NPE)の主成分構造等**

	
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	C ₃₃ H ₆₀ O ₁₀ 又は C ₃₅ H ₆₄ 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

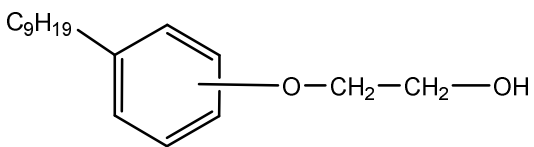
	
評価対象物質名称	ノニルフェノールジエトキシレート
分子式	C ₁₉ H ₃₂ O ₃
CAS 登録番号	20427-84-3 など

2

3

4

表 1 - 7 評価対象物質(変化物 2:NPE1)の構造等

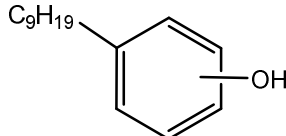
	
評価対象物質名称	ノニルフェノールモノエトキシレート
分子式	C ₁₇ H ₂₈ O ₂
CAS 登録番号	104-35-8 など

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

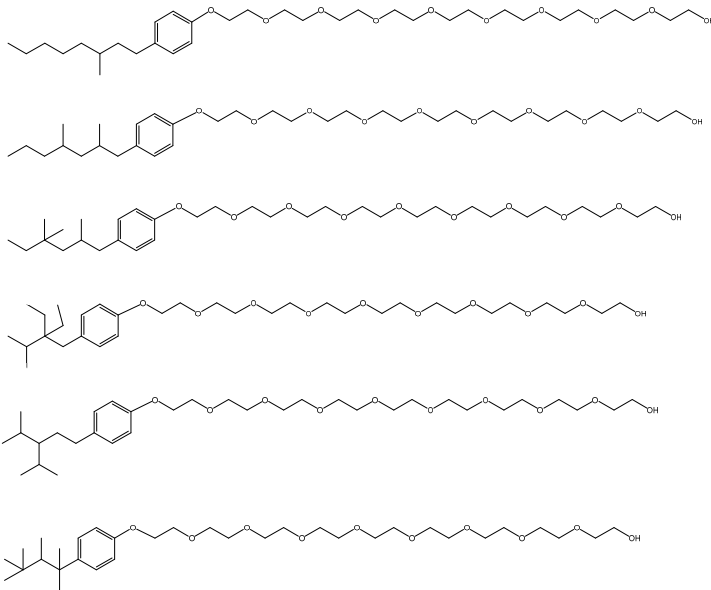
23

24

25

26

27



1

2

3

融点

4

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。

9

10

沸点

11

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。

17

18

蒸気圧

19

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。

23

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-オクタノ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。

情報源略称	詳細等
AIST	産業技術総合研究所: 詳細リスク評価書
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
Australia	NICNAS: Environment Tier II Assessment
Canada	PRIORITY SUBSTANCES LIST ASSESSMENT REPORT
ECHA	Information on Chemicals – Registered substances.
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
MOE初期評価	環境省環境リスク評価室: 「化学物質の環境リスク評価」
NITE初期リスク評価書	(独)製品評価技術基盤機構: 「化学物質の初期リスク評価書」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

NPE (親物質)

融点 NPE9、NPE10に関するデータ

 キースタディ

収集データ

PACS F等	CASRN	情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キース タディ該 非 (評価 I)	キース タディ該 非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
86000	9016-45-9	1 Aldrich	融点 (cloud)	45-50°C						-		2B	×	×	平均モル重量680		
86010	68412-54-4	2 Aldrich	融点	46~47 ° C[n=40]	46.5					-		2B	×	×	NPE40		
86000	9016-45-9	3 HSDB	融点	42~43 ° C	42.5					-		2B	×	×		Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 (1992)	Chemical/Physical Properties: > Melting Point:
86013	26571-11-9	4 HSDB	凝固点	26 °F	-3.33333					-		2B	×	×	NPE9	O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2006., p. 1154	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties
86013	26571-11-9	5 HSDB	流動点	37 °F	2.777778					-		2B	×	×	NPE9	O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2006., p. 1154	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties
86000	9016-45-9	6 MOE初期評価	融点	2.8 ° C[NPE9]	2.8					-		2B	○	○	NPE9	Weinheimer, R.M. and P.T. Varineau (1998): Polyoxyethylene alkylphenols. Cited in: N.M. van Os ed., Nonionic surfactants, organic chemistry. Marcel Dekker, Inc., New York, NY. pp. 39-85. Cited in: カナダ環境省及び厚生省 (2001): Priority Substances List Assessment Report. Nonylphenol and its Ethoxylates. 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.でも引用	001_p.1
86000	9016-45-9	7	融点	210 °C	210	MPBPWIN				estimated by calculation		4C	×	×		U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42.	002_p.1
86001	20427-84-3	8	融点	210 °C	210	MPBPWIN				estimated by calculation		4C	×	×			p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
86003	26027-38-3	9	融点	210 °C	210	MPBPWIN	-	-	-	estimated by calculation		4C	×	×		U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42..	p.1
86009	51938-25-1	10	融点	210 °C	210	MPBPWIN	-	-	-	estimated by calculation		4C	×	×		U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42..	p.1
86000	9016-45-9	11 NITE初期リスク評価書	凝固点	-20 ° C[NPE9.5]	-20					-		2B	×	×	NPE9.5	化学物質評価研究機構 (2003a) 調査資料 (未公表).	p.2
86000	9016-45-9	12 ECHA	融点	>42~44 ° C[> 42 < 44 °C]	42			2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan.1992, Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 (1992)].	Melting point / freezing point

NPE(親物質)

融点 NPE9、NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

PACS- CASRN
F 等

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
13 86010 68412-54-4	融点	-55 ° C[mean melting point]	-55	OECD TG 102	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	×		study report, Unnamed, 2010	Melting point / freezing point
14 86000 9016-45-9	既存点検事 業	流動点 42~43 ° C	42.5					-		4A	×	×	NPE30	提示資料	

NPE(親物質)

沸点 NPE9、NPE10に関するデータ
 キースタディ

収集データ

PACS_ CASRN
F等

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPaにおける 沸点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キース タディ該 非 (評価 I)	キース タディ該 非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
86010 68412-54-4	1 Aldrich	250 °C	250	250	760 mmHg				-		2B	×	×	NPE9-10		p.1519
86000 9016-45-9	2 EPI Suite	369.64 °C	369.64		MPBPWIN				(Q)SAR		2C	○	×	代表物質のSMILESを用いた便宜的な推計		
追加	3 EPI Suite	622 °C ~ 645 °C	634	634	MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	×	○	NPE9 6つの異性体での値(°C): 645、638、633、633、 631、622の算術平均値		
86000 9016-45-9	4 MOE初期評価	510 °C	510		MPBPWIN				estimated by calculation		4C	×	×	U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42.		002_p.1
86001 20427-84-3	5	510 °C	510		MPBPWIN				estimated by calculation		4C	×	×			p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
86003 26027-38-3	6	510 °C	510		MPBPWIN	-	-	-	estimated by calculation		4C	×	×	U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42..		p.1
86009 51938-25-1	7	510 °C	510		MPBPWIN	-	-	-	estimated by calculation		4C	×	×	U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42..		p.1
86000 9016-45-9	8 ECHA	>295 ~ 320 °C[> 295 < 320 °C]	295		EU Method A.2		2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×	Alkylphenol ethoxylates, 2010, Draft Interim REL March 2010.		Boiling point
86010 68412-54-4	9	354.34 ° C[Mean boiling point]	354.34	354.3372	1013.3 hPa[mean atmospheric pressure]	OECD TG 103	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	×	study report, Unnamed, 2010	Boiling point

NPE(親物質)

蒸気圧 NPE9、NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価I)	キースタディ該非 (評価I)	キースタディ該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等	
PACS F等 CASRN																	
追加	1	EPI Suite	2.5x10 ⁻¹³ Pa ~ 1.4x10 ⁻¹² Pa	6.7x10 ⁻¹³	6.7x10 ⁻¹³	20 °C	MPBPWIN			(Q)SAR	Selected VP (Modified Grain Method)	4C	×	○	NPE9 融点は2.8°Cを入力 6つの異性体での値 (Pa): 2.5 × 10 ⁻¹³ 、4.2 × 10 ⁻¹³ 、6.0 × 10 ⁻¹³ 、6.0 × 10 ⁻¹³ 、7.1 × 10 ⁻¹³ 、1.4 × 10 ⁻¹² の算術平均値		
86000 9016-45-9	2	HSDB	9.4E-5 mmHg	0.012532	8.88E-03	25 °C				外挿 (補外)		4C	×	×	Daubert TE, Danner RP; Data Compilation, Tables of Properties of Pure Compounds, New York, NY: Design Inst for Phys Prop Data, Am Inst for Phys Prop Data (1989)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate:	
86000 9016-45-9	3		3.2E-10 mmHg	4.27E-08	3.02E-08	25 °C	その他,a fragment constant method			estimated by calculation		4C	×	×	SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate:	
86003 26027-38-3	4		9.7E-13 mmHg	1.29E-10	9.17E-11	25 °C				estimated by calculation	determined from a fragment constant method	4C	×	×	SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate:	
86003 26027-38-3	5		6.69E-13 mmHg[estimated physical properties based upon 5 ethoxylates]	8.92E-11	6.32E-11	25 °C				estimated by calculation		4C	×	×	NPE5 US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Oct 25, 2012: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm	Chemical/Physical Properties: > Vapor Pressure:	
86013 26571-11-9	6	HSDB	4.61E-18 mmHg	6.15E-16	4.36E-16	25 °C				estimated by calculation		4C	×	×	NPE9 US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Oct 24, 2012: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm	Chemical/Physical Properties: > Vapor Pressure	
86000 9016-45-9	7	MOE初期評価	1.29E-10 Pa[9.7x10 ⁻¹³ mmHg (=1.29x10 ⁻¹⁰ Pa)]	1.29E-10	9.14E-11	25 °C				-		2B	×	×	U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42.	002_p.1	
86001 20427-84-3	8		1.29E-10 psi[9.7x10 ⁻¹³ mmHg (=1.29x10 ⁻¹⁰ Pa)]	8.89E-07	6.31E-07	25 °C	MPBPWIN			estimated by calculation		4C	×	×		p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状	

NPE(親物質)

蒸気圧 NPE9、NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価 I)	キースタディ該非 (評価 I)	キースタディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
PACS F 等 CASRN 86003 26027-38-3	0.00000000129 Pa[9.7x10-13 mmHg (=1.29x10-10 Pa) (25°C)]	1.29E-10	9.14E-11	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	×		U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42..	p.1
86009 51938-25-1	MOE初期評価 0.00000000129 Pa[9.7x10-13 mmHg (=1.29x10-10 Pa) (25°C)]	1.29E-10	9.14E-11	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	×		U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42..	p.1
86000 9016-45-9	NITE初期リスク評価書 3.2E-08 Pa[NPE6]	3.2E-08	2.27E-08	25 °C					estimated by calculation		4C	×	×	NPE6	U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2003) HSDB, Hazardous Substances Data Bank. (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用)	p.2
86000 9016-45-9	ECHA 0.14 kPa	140	99.24637	25 °C	OECD TG 104	yes	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1A	○	×		study report, Unnamed, 2012	Vapour pressure
86010 68412-54-4	0.00043 hPa	0.043	0.043	20 °C	OECD TG 104	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	×		2010,2010-07-15.	Exp Key Vapour pressure.001
86010 68412-54-4	0.00066 hPa	0.066	4.68E-02	25 °C	OECD TG 104	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	×		2010,2010-07-15.	Exp Key Vapour pressure.001
86010 68412-54-4	0.0048 hPa	0.48	7.15E-02	50 °C	OECD TG 104	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×	×		2010,2010-07-15.	Exp Key Vapour pressure.001
86010 68412-54-4	0 hPa	0	0	20 °C	OECD TG 104	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	×		study report, Unnamed, 2010	Vapour pressure
86010 68412-54-4	0.001 hPa	0.1	7.09E-02	25 °C	OECD TG 104	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	×		study report, Unnamed, 2010	Vapour pressure
86010 68412-54-4	0.005 hPa	0.5	7.44E-02	50 °C	OECD TG 104	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×	×		study report, Unnamed, 2010	Vapour pressure

NPE(親物質)

水溶解度 NPE9、NPE10に関するデータ

 キースタディ

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキース タディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キース タディ該 非 (評価 I)	キース タディ該 非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 Australia 追加	49.6 mg/L	49.6 mg/L	46.3	25°C (元 文献で確 認)						-			×	×	NPE10 臨界ミセル濃度 (CMCs)	Environment Tier II Assessment for Nonylphenol Ethoxylates and their Sulfate and Phosphate Esters (25 July 2017). 元文献: Mukerjee P and Mysels KJ (1971). Critical micelle concentrations of aqueous surfactant systems. National Bureau of Standards, Washington DC, USA.	Physical Chemical Properties > Water Solubility
2 HSDB 86000 9016-45-9	>1000 mg/L	1000								-		4A	×	×		Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4- 89074-101-1 (1992)	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
3 HSDB 86003 26027-38-3	>1000 mg/L [Poly (degree of polymerizat ion=10) oxyethylen e para- nonylpheny l]	1000								-		4A	×	×	NPE10	Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4- 89074-101-1 P. 7-3 (1992)	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
4 [higher adducts: soluble in water] 86003 26027-38-3	[higher adducts: soluble in water]	単位換算不 可								-		3	×	×	n<6 水に可溶	O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2006., p. 1154	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
5 HSDB 86013 26571-11-9	0.522 mg/L	0.522	0.4872904	25 °C						estimated by calculation		4C	×	×	NPE9	US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Oct 24, 2012: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite1.htm	Chemical/Physical Properties: > Solubilities
6 HSDB 86013 26571-11-9	水、エタノ ール、エチレ ングリコール、 エチレンジク ロライド、キ シレン、コー ン油に可 溶。ストダ ード溶剤、脱 臭灯油、低 粘度白色鉱 油に不溶。	単位換算不 可								-		3	×	×	NPE9	O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2006., p. 1154	Chemical/Physical Properties: > Solubilities
7 MOE初期評価 86000 9016-45-9	[酸化エチ レン7モル 以上で可 溶]	単位換算不 可								-		3	×	×	N=7以上で可溶	Cosmetic Ingredient Review (1983): Final report on the safety assessment of Nonoxynols -2, -4, -8, -9, -10, -12, -14, -15, -30, -40, and -50. J. Am. Coll. Toxicol. 2: 35-60..	001_p.1

NPE(親物質)

水溶解度 NPE9、NPE10に関するデータ
キースタディ

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キースタディ-該非 (評価 I)	キースタディ-該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
86000 9016-45-9	0.83 mg/L	0.83	0.7748103	25 °C		WSKOWWIN				estimated by calculation		4C	×	×	N=7以上で可溶	U.S. Environmental Protection Agency, WSKOWWIN™ v.1.41.	002_p.1
86001 20427-84-3	0.83 mg/L	0.83	0.7748103	25 °C		WSKOWWIN				estimated by calculation		4C	×	×			p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
86003 26027-38-3	0.83 mg/L	0.83	0.7748103	25 °C		WSKOWWIN	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	×		U.S. Environmental Protection Agency, WSKOWWIN™ v.1.41..	p.1
86009 51938-25-1	0.83 mg/L	0.83	0.7748103	25 °C		WSKOWWIN	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	×		U.S. Environmental Protection Agency, WSKOWWIN™ v.1.41..	p.1
86000 9016-45-9	[可溶 (NPE9.5)]	単位換算不可								-		3	×	×	NPE9.5	化学物質評価研究機構 (2003a) 調査資料 (未公表).	p.2
86000 9016-45-9	[エチレンオキシドの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、また、アルキル鎖の分岐により水溶解性は増加]	1×10 ⁶ (参考値として設定)	1×10 ⁶							-		3	×	○	N=7以上で可溶、分岐により増加 NPE9の値を参考値として 1×10 ⁶ mg/Lと設定した	Talmage, S.S. (1994) Environmental and Human Safety of Major Surfactants: Alcohol Ethoxylates and Alkylphenol Ethoxylates. The Soap and Detergent Association, Lewis Publishers, Boca Raton. 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.でも引用	p.2
86000 9016-45-9	153 g/L	153000	153000	20 °C	5.5	OECD TG 105	yes	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1A	○	×		study report, Unnamed, 2012	Water solubility
86010 68412-54-4	<4.55 mg/L	4.55	4.55	20 °C		その他,OECD Guideline 115	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×	×		study report, Unnamed, 2010	Exp Key Water solubility.001
86000 9016-45-9	既存点検事業 ≥10000 ppm	10000								-		4A	×	×			
86003 26027-38-3	既存点検事業 ≥1000	1000								-		4A	×	×	NPE10	提示資料	001_p.1

NPE (親物質)

logPow NPE9、NPE10に関するデータ

 キースタディ

収集データ

PACS
F等 CASRN

追加

86003 26027-38-3

86013 26571-11-9

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86010 68412-54-4

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	3.2	3.2			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	○	NPE9 6つの異性体での値: 3.3、3.2、3.2、3.2、3.2、 3.1の算術平均値		
2 HSDB	4.48[estim ated physical properties based upon 5 ethoxylate s]	4.48							estimated by calculation		4C	×	×	NPE5	US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Oct 25, 2012: <a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/
pubs/episuitd.htm">http://www.epa.gov/oppt/exposure/ pubs/episuitd.htm	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient:
3 HSDB	3.38	3.38							estimated by calculation		4C	×	×	NPE9	US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Oct 24, 2012: <a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/
pubs/episuitd.htm">http://www.epa.gov/oppt/exposure/ pubs/episuitd.htm	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient:
4 MOE初期評 価	3.59[NPE 9]	3.59							-		2B	×	×	NPE9	Ahel, M. and W. Giger (1993): Partitioning of alkylphenols and alkylphenol polyethoxylates between water and organic solvents. Chemosphere. 26: 1471- 1478. カナダ環境省及び厚生省(2001): Priority Substances List Assessment Report. Nonylphenol and its Ethoxylates. でも引用	001_p.1
5 ECHA	3.7	3.7	25 °C	[pH value is unknown]	OECD TG 117		2: reliable with restrictio ns	key study	experimental result		1B	○	×		study report, Unnamed, 2012	Exp Key Partition coefficient.002
6	4.48	4.48	[temperat ure and pH are not available]	[tempera ture and pH are not available]	KOWWIN		2: reliable with restrictio ns	key study	(Q)SAR		4C	×	×		KowWin estimated, US Environmental Protection Agency's Office of Pollution Prevention and Toxics and Syracuse Research Corporation (SRC), 2000, EPISUIT4.1.	QSAR Key Partition coefficient.001
7	5.39[Aver age mean value]	5.39			KOWWIN	no	2: reliable with restrictio	key study	estimated by calculation		4C	×	×	直鎖NPE9のlogPowより 低い値だった	Modeling, Unnamed, 2010	Calc Key Partition coefficient.002

NPE (親物質)

Koc NPE9、NPE10に関するデータ
 キースタディ

収集データ

PACS_ F等	CASRN	情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キースタディ該非 (評価 I)	キースタディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
86000	9016-45-9	1 HSDB	Koc	6.1	6.1			sediment					experimental result	measured in sediment	2B	○	×		Urano K et al; Chemosphere 13: 293-300 (1984)	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
86003	26027-38-3	2	Koc	1300[based upon 5 ethoxylates]	1300								estimated by calculation	a structure estimation method	4C	×	×	NPE5	SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
86013	26571-11-9	3 HSDB	Koc	4300	4300								estimated by calculation		4C	×	×	NPE9	SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility
86000	9016-45-9	4 MOE初期評価	Koc	6.1[6EO]	6.1								-		2B	○	×	NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300.	002_p.2
86001	20427-84-3	5	Koc	6.1[6EO]	6.1										2B	×	×			p.2、1. 物質に関する基本的事項(3) 環境運命に関する基礎的事項
86003	26027-38-3	6	Koc	6.1	6.1			-	-	-	-	-			2B	×	×	6.1 (6EO) NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300..	p.2
86009	51938-25-1	7	Koc	6.1	6.1			-	-	-	-	-			2B	×	×	6.1 (6EO) NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300..	p.2
86000	9016-45-9	8 NITE初期リスク評価書	Koc	6.1[NPE6]	6.1								experimental result		2B	○	×	NPE6	U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2003) HSDB, Hazardous Substances Data Bank. (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/isis/htmlgen?HSDBから引用)	p.2
86010	68412-54-4	9 ECHA	Koc	2661 L/kg	2661				KOCWIN	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	×	NOE1-6のそれぞれのKocの平均値	KOCWIN v2.00 (EPIWEB v 4.0), U.S. Environmental Protection Agency, 2009, US EPA. [2009]. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.00. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.	Adsorption / desorption
追加		10 Urano (1984)	Koc	6.1 L/g	6100								experimental result		2B	×	○	NPE10 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の吸着等温式に基づいて算出	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300.	

NPE(親物質)

ヘンリー係数

NPE9、NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
PACS_ CASRN F 等														
追加	1 EPI Suite	4.0x10 ⁻¹⁷ Pa・m ³ /mol	4.0x10 ⁻¹⁷				(Q)SAR		2C	×	○	6つの異性体の20°Cでの値: 4.0 × 10 ⁻¹⁷ Pa・m ³ /mol		
86000 9016-45-9	2 HSDB	2.45E-9 atm・m ³ /mol[for nonylphenol]	2.48E-04				experimental result		2B	○	×	NP		ENVIRONMENTAL FATE:
86000 9016-45-9	3	4.1E-12 atm・m ³ /mol	4.15433E-07				estimated by calculation	a fragment constant estimation method	4C	×	×	NPE6	Hellmann H; Fresenius' Z Anal Chem 328: 475-9 (1987)	Environmental Fate & Exposure: > Volatilization from
86003 26027-38-3	4	2.62E-17 atm・m ³ /mol[estimated physical properties based upon 5 ethoxylates]	2.65E-12				estimated by calculation		4C	×	×	NPE5	US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Oct 25, 2012: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
86013 26571-11-9	5 HSDB	5.6E-22 atm・m ³ /mol	5.67E-17				estimated by calculation		4C	×	×	NPE9	US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Oct 24, 2012: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm SRC	Environmental Fate & Exposure: > Volatilization from Water/Soil ; Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties
86000 9016-45-9	6 NITE初期リスク評価書	4.2E-07 Pa・m ³ /mol[4.2x10 ⁻⁷ Pa・m ³ /mol (4.1x10 ⁻¹² atm・m ³ /mol) (NPE6)]	0.00000042				estimated by calculation		4C	×	×	NPE6	U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2003) HSDB, Hazardous Substances Data Bank. (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用)	p.2
86010 68412-54-4	7 ECHA	0.0325 Pa・m ³ /mol	0.0325				estimated by calculation		4C	×	×	NPE2	2009	Calc Key Henry's Law constant.001
86010 68412-54-4	8	0.033 Pa・m ³ /mol	0.033				estimated by calculation		4C	×	×	NPE1-6のそれぞれのヘンリー係数の平均値	HENRYWIN v3.20 (EPIWEB v 4.0) , U.S. Environmental Protection Agency, 2009, US EPA. [2009]. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.00. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.	Henry's Law constant

NPE(親物質)

蓄積性 NPE9、NPE10に関するデータ
 キースタディ

収集データ

PACS _F 等	CASRN	情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期 間	項目	項目の 種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類 の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
	86000 9016-45-9	1 HSDB		2	0.2 mg/L		BCF	-	<1.4	1.4					experimental result		2B	×	×		Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:	
	86000 9016-45-9	2		1	2.0 mg/L		BCF	-	<0.2	0.2					experimental result		2B	×	×		Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:	
	86003 26027-38-3	3		1	0.1 mg/L		BCF	-	7.6~12.4	10					experimental result		2B	×	×	Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:	
	86003 26027-38-3	4		2	1 mg/L		BCF	-	9.09~16	12.545					experimental result		2B	×	×	Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:	
	86013 26571-11-9	5 HSDB		1			BCF		44[log Kow of 3.38]a regression-derived equation]	44					estimated by calculation		4C	×	×	NPE9	SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration
	86000 9016-45-9	6 MOE初期評価	低濃縮性	1	0.1 mg/L		BCF		7.6~12[(7.6~(12)]	9.8					experimental result		2B	×	×		(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/kizon/KI_ZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在). (生物濃縮係数) 通産省公報 (1982.12.28). (生物濃縮性)	002_p.2
	86000 9016-45-9	7	低濃縮性	1	0.2 mg/L		BCF		<1.4	1.4					experimental result		2B	×	×	ポリオキシエチレンノニルフェニルエーテル	(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/kizon/KI_ZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在). (生物濃縮係数) 通産省公報 (1979.12.20). (生物濃縮性)	002_p.2
	86000 9016-45-9	8	低濃縮性	1	1.0 mg/L		BCF		9.09~16.0	12.545					experimental result		2B	×	×		(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/kizon/KI_ZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在). (生物濃縮係数) 通産省公報 (1982.12.28). (生物濃縮性)	002_p.2
	86000 9016-45-9	9	低濃縮性	1	2 mg/L		BCF		<0.2	0.2					experimental result		2B	×	×		(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/kizon/KI_ZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在). (生物濃縮係数) 通産省公報 (1979.12.20). (生物濃縮性)	002_p.2
	86003 26027-38-3	10 MOE初期評価	低濃縮性	1	0.1 mg/L		BCF		7.6~12[(7.6~(12)]	9.8					experimental result		2B	×	×	NPE10、p体	(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/kizon/KI_ZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在). (生物濃縮係数) 通産省公報 (1982.12.28). (生物濃縮性)	p.2

NPE(親物質)

蓄積性

NPE9、NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

PACS _F等	CASRN	情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期 間	項目	項目の 種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類 の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価I)	キースタ ディ該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
86003	26027-38-3	MOE初期評価	低濃縮 性	1	1.0 mg/L		BCF		9.09~16.0	12.545					experimental result		2B	×	×	ポリ(重合度 =10)オキシ エチレン二 p-ノニルフェ ニルエーテ ル NPE10、p体	(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/kizon/KI ZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現 在). (生物濃縮係数) 通産省公報 (1982.12.28). (生物濃縮性)	p..2
86000	9016-45-9	NITE初期リ スク評価書	低濃縮 性	2	0.2 mg/L		その他		<1.4	1.4	化審法TG				experimental result		1B	×	×	NPE30-50	経済産業省, 1982(該当文献なし)	p.7
86000	9016-45-9		低濃縮 性	1	2 mg/L		その他		<0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1B	×	×	NPE30-50	経済産業省, 1982(該当文献なし)	p.7
86010	68412-54-4	ECHA		1			BCF		40.38 L/kg	40.38	BCFBAFWI N	no	2: reliable with restrictions	supporting study	estimated by calculation		4C	×	×		BCFBAF v3.01 (EPIWEB v 4.1) estimation for NPEO, U.S. Environmental Protection Agency, 2014, Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.1. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA	Calc Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
86010	68412-54-4			1	[100% wastewater]		BCF		100 無次元	100		no data	4: not assignable	supporting study	experimental result		4A	×	×	対象データ でなかった	publication, Unnamed, 1991	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
86010	68412-54-4			1	40 μ g/L[NP]		BCF		>300~400[> 300 - < 400]	300		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×		Bioaccumulation of nonylphenol in caged mussels in an industrial coastal area on the Swedish West Coast, Granmo Å, Ekelund R, Berggren and Magnussen K, 1991, In: Organic Micropollutants in the Aquatic Environment. G. Angeletti et al. (eds). Springer Science + Business Media Dordrecht	Read-across Subs WoE Bioaccumulation: aquatic / sediment.002
86010	68412-54-4			3	40 μ g/L[NP-2]		BCF		>50~100[> 50 - < 100]	50		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×	NPE2	Bioaccumulation of nonylphenol in caged mussels in an industrial coastal area on the Swedish West Coast, Granmo Å, Ekelund R, Berggren and Magnussen K, 1991, In: Organic Micropollutants in the Aquatic Environment. G. Angeletti et al. (eds). Springer Science + Business Media Dordrecht	Read-across Subs WoE Bioaccumulation: aquatic / sediment.002
86010	68412-54-4			4	50 μ g/L[NP-3]		BCF		50	50		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×	NPE3	Bioaccumulation of nonylphenol in caged mussels in an industrial coastal area on the Swedish West Coast, Granmo Å, Ekelund R, Berggren and Magnussen K, 1991, In: Organic Micropollutants in the Aquatic Environment. G. Angeletti et al. (eds). Springer Science + Business Media Dordrecht	Read-across Subs WoE Bioaccumulation: aquatic / sediment.002
86010	68412-54-4			2	60 μ g/L[NP-1]		BCF		>100~200[> 100 - < 200]	100		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×	NPE1	Bioaccumulation of nonylphenol in caged mussels in an industrial coastal area on the Swedish West Coast, Granmo Å, Ekelund R, Berggren and Magnussen K, 1991, In: Organic Micropollutants in the Aquatic Environment. G. Angeletti et al. (eds). Springer Science + Business Media Dordrecht	Read-across Subs WoE Bioaccumulation: aquatic / sediment.002
86000	9016-45-9	既存点検事業		2	0.2 ppm[W/V]	2週	Rawデータ	-	<=1.4	1.4	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4

NPE(親物質)

蓄積性 NPE9、NPE10に関するデータ
ケーススタディ

収集データ

PACS _F 等	CASRN	情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期 間	項目	項目の 種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるケース スタディの該非	値の種類	値の種類 の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	ケース スタ ディ該 非 (評価 I)	ケース スタ ディ該 非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
86000	9016-45-9			2	0.2 ppm[W/V]	2週	Rawデータ	-	<=1.4	1.4	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			2	0.2 ppm[W/V]	3週	Rawデータ	-	<=1.4	1.4	化審法TG				experimental result		1A	○	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			2	0.2 ppm[W/V]	3週	Rawデータ	-	<=1.4	1.4	化審法TG				experimental result		1A	○	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			2	0.2 ppm[W/V]	4週	Rawデータ	-	<=1.4	1.4	化審法TG				experimental result		1A	○	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			2	0.2 ppm[W/V]	4週	Rawデータ	-	<=1.4	1.4	化審法TG				experimental result		1A	○	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			2	0.2 ppm[W/V]	6週	Rawデータ	-	<=1.4	1.4	化審法TG				experimental result		1A	○	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			2	0.2 ppm[W/V]	6週	Rawデータ	-	<=1.4	1.4	化審法TG				experimental result		1A	○	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			1	2 ppm[W/V]	2週	Rawデータ	-	<=0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			1	2 ppm[W/V]	2週	Rawデータ	-	<=0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			1	2 ppm[W/V]	3週	Rawデータ	-	<=0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			1	2 ppm[W/V]	3週	Rawデータ	-	<=0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			1	2 ppm[W/V]	4週	Rawデータ	-	<=0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			1	2 ppm[W/V]	4週	Rawデータ	-	<=0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			1	2 ppm[W/V]	6週	Rawデータ	-	<=0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4
86000	9016-45-9			1	2 ppm[W/V]	6週	Rawデータ	-	<=0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×	平均重合度 30		001_p.4
86003	26027-38-3	既存点検事業		2	0.1 ppm[W/V]	2週	Rawデータ	-	11[参考値]	11	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	既存点検事業		2	0.1 ppm[W/V]	2週	Rawデータ	-	12[参考値]	12	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	既存点検事業		2	0.1 ppm[W/V]	3週	Rawデータ	-	12[参考値]	12	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4

NPE(親物質)

蓄積性 NPE9、NPE10に関するデータ
 キースタディ

収集データ

PACS _F等	CASRN	情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期 間	項目	項目の 種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類 の詳細	信頼性 ランク (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価I)	キースタ ディ該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
86003	26027-38-3	39 既存点検事業		2	0.1 ppm[W/V]	3 週	Rawデータ	-	10[参考値]	10	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	40 既存点検事業		2	0.1 ppm[W/V]	4 週	Rawデータ	-	11[参考値]	11	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	41 既存点検事業		2	0.1 ppm[W/V]	4 週	Rawデータ	-	7.9[参考値]	7.9	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	42 既存点検事業		2	0.1 ppm[W/V]	6 週	Rawデータ	-	9.1[参考値]	9.1	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	43 既存点検事業		2	0.1 ppm[W/V]	6 週	Rawデータ	-	7.6[参考値]	7.6	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	44 既存点検事業		1	1.0 ppm[W/V]	2 週	Rawデータ	-	9.81	9.81	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	45 既存点検事業		1	1.0 ppm[W/V]	2 週	Rawデータ	-	12.5	12.5	化審法TG				experimental result		1A	×	×	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	46 既存点検事業		1	1.0 ppm[W/V]	3 週	Rawデータ	-	10.1	10.1	化審法TG				experimental result		1A	×	○	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	47 既存点検事業		1	1.0 ppm[W/V]	3 週	Rawデータ	-	9.49	9.49	化審法TG				experimental result		1A	×	○	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	48 既存点検事業		1	1.0 ppm[W/V]	4 週	Rawデータ	-	12.7	12.7	化審法TG				experimental result		1A	×	○	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	49 既存点検事業		1	1.0 ppm[W/V]	4 週	Rawデータ	-	16	16	化審法TG				experimental result		1A	×	○	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	50 既存点検事業		1	1.0 ppm[W/V]	6 週	Rawデータ	-	9.09	9.09	化審法TG				experimental result		1A	×	○	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4
86003	26027-38-3	51 既存点検事業		1	1.0 ppm[W/V]	6 週	Rawデータ	-	11.2	11.2	化審法TG				experimental result		1A	×	○	NPE10 ×10した値 を記載		001_p.4

NPE(親物質)

解離定数 NPE9、NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
PACS F等 CASRN 86000 9016-45-9	1 NITE初期リ スク評価書	その他	[解離基なし]	算出不可						-		x			p.2
86010 68412-54-4	2 ECHA	pKa	[Due to the low sol ubiliy and the UV/VIS absorption properties of the substance, an experimental determinatio n of the dissociation constant according to OECD guideline 112 is not possible.]	算出不可		OECD TG 112	no	1: reliable without restriction	key study	experimenta l result		x		study report, Unnamed, 2010	Dissociation constant

NPE (親物質)

環境中運命 NPE9, NPE10に関するデータ
 キースタディ

収集データ

PACS CASRN
F 等

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期 [day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等	
1 AIST	水域	生分解(好氣的)	0.000574-0.0412 (1/h) 算術平均値 0.00621 (1/h) 単位換算: 0.014~1.0 (1/日) 算術平均値 0.15 (1/日)			4.7 日		4.7								-	文献から得られた半減期をもとに、一次反応を仮定してNPnEO及びNPの分解速度を算出	×	NPnEO及び NP	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		
2 EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		1.5×10^{-10} ~ 1.6×10^{-10} cm ³ /molecule/sec	1.5×10^5 molecule/cm ³	0.10 日		0.1			AOPWIN					estimated by calculation		○	NPE9 6つの異性体での値 (cm ³ /molecule/sec): 1.6×10^{-10} , 1.6×10^{-10} , 1.6×10^{-10} , 1.6×10^{-10} , 1.6×10^{-10} , 1.5×10^{-10} のうち最大値を半減期算出に利用	AopWin v1.92 (EPIWEB v 4.0), U.S. Environmental Protection Agency, 2009, (EPIWEB v 4.0) US EPA. [2009]. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.00. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.	Phototransformation in air	
3 HSDB	水域	生分解(好氣的)					97 % [after 30 days for standing samples]									experimental result	sediment inocula from the Yahagi River, Kawasaki, Japan	×	NPE9(文献より)	Yoshimura K et al; J Amer Oil Chem Soc 63: 1590-96 (1986) 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. でも引用	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:	
4 HSDB	水域	生分解(好氣的)					98 % [after 30 days for stirred samples]									experimental result	sediment inocula from the Yahagi River, Kawasaki, Japan	×	NPE9(文献より)	Yoshimura K et al; J Amer Oil Chem Soc 63: 1590-96 (1986) 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. でも引用	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:	
5	水域	生分解(好氣的)					84 % [Results from an aerobic closed bottle test conducted at an initial concentration of 2 ppm indicated 29% BODT and 84% analytical loss of a mixture of linear and branched polyethylene glycol nonylphenyl ethers after 30 days[analytical loss]]				その他, aerobic closed bottle test						experimental result		×	Fischer WK, Gerike P; Water Res 9: 1137-41 (1975)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:	
6	水域	生分解(好氣的)					29 % [Results from an aerobic closed bottle test conducted at an initial concentration of 2 ppm indicated 29% BODT and 84% analytical loss of a mixture of linear and branched polyethylene glycol nonylphenyl ethers after 30 days[BODT]]				その他, aerobic closed bottle test						experimental result		×	Fischer WK, Gerike P; Water Res 9: 1137-41 (1975)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:	
7	水域	生分解(好氣的)					90 % [aerobic OECD confirmatory test was conducted using a sewage sludge inoculum acclimated for 34 days, a retention time of 3 hours, and an initial concentration of 20 ppm of a mixture of branched and linear polyethylene glycol nonylphenyl ethers]				その他, aerobic OECD confirmatory test						experimental result		×	Fischer WK, Gerike P; Water Res 9: 1137-41 (1975)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:	
8 HSDB	水域	生分解(好氣的)					98 % [after 30 days for standing samples]				その他, aerobic river die-away test						experimental result	aerobic river die-away test with an inoculum obtained from the Arakawa River, Horikiri, Japan	×	NPE9(文献より)	Yoshimura K et al; J Amer Oil Chem Soc 63: 1590-96 (1986) 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. でも引用	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:

追加

追加

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

NPE (親物質)

環境中運命

NPE9、NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期 [day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ 該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
PACS- CASRN F等 86000 9016-45-9	9	HSDB	水域	生分解 (好氣的)			99 %[after 30 days for stirred samples]				その他,aerobic river die-away test					experimental result	aerobic river die-away test with an inoculum obtained from the Arakawa River, Horikiri, Japan	×	NPE9(文献より)	Yoshimura K et al; J Amer Oil Chem Soc 63: 1590-96 (1986) 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. でも引用	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	10	HSDB	水域	生分解 (好氣的)			57 %[for the 10 ethoxylate unit compound at 3 mg/L after 14 days]				その他,BOD test,					experimental result	activated sludge	×	NPE10	Urano K, Saito M; Chemosphere 14: 1333-42 (1985) 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. でも引用	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	11	HSDB	水域	生分解 (好氣的)			42 %[for the 10 ethoxylate unit compound at 10 mg/L after 14 days]				その他,BOD test,					experimental result	activated sludge	×	NPE10	Urano K, Saito M; Chemosphere 14: 1333-42 (1985) 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. でも引用	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	12	HSDB	水域	生分解 (好氣的)			40 %[for the 10 ethoxylate unit compound at 30 mg/L after 14 days]				その他,BOD test,					experimental result	activated sludge	×	NPE10	Urano K, Saito M; Chemosphere 14: 1333-42 (1985) 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. でも引用	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	13	HSDB	水域	生分解 (好氣的)			25 %[for the 10 ethoxylate unit compound at 100 mg/L after 14 days]				その他,BOD test,					experimental result	activated sludge	×	NPE10	Urano K, Saito M; Chemosphere 14: 1333-42 (1985) 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. でも引用	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	14		水域	生分解 (好氣的)			93 %[in 14 days]				その他,a river die-away, Spanish Official (adapted for anionic compounds), OECD Spanish Official (adapted for nonanionic compounds), and OECD confirmatory test					experimental result		×		Ruiz Cruz PJ, Dobarganes Garcis MC; Grasas y Aceites 29: 1-8 (1978)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	15		水域	生分解 (好氣的)			70 %[in 21 days]				その他,a river die-away, Spanish Official (adapted for anionic compounds), OECD Spanish Official (adapted for nonanionic compounds), and OECD confirmatory test					experimental result		×		Ruiz Cruz PJ, Dobarganes Garcis MC; Grasas y Aceites 29: 1-8 (1978)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	16		水域	生分解 (好氣的)			68 %[in 8 days]				その他,a river die-away, Spanish Official (adapted for anionic compounds), OECD Spanish Official (adapted for nonanionic compounds), and OECD confirmatory test					experimental result		×		Ruiz Cruz PJ, Dobarganes Garcis MC; Grasas y Aceites 29: 1-8 (1978)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	17		水域	生分解 (好氣的)			91 %[in 8 days]				その他,a river die-away, Spanish Official (adapted for anionic compounds), OECD Spanish Official (adapted for nonanionic compounds), and OECD confirmatory test					experimental result		×		Ruiz Cruz PJ, Dobarganes Garcis MC; Grasas y Aceites 29: 1-8 (1978)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:

NPE (親物質)

環境中運命

NPE9, NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期 [day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ 該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
PACS- CASRN F等 86000 9016-45-9	水域	生分解 (好氣的)					90%									experimental result	during activated sludge treatment	×	NPE3-20	Giger W, Ahel M; pp. 87-103 in Proc Sem Nonylphenoethoxylates (NPE) and Nonylphenol (NP). Solna, Sweden: Swedish Environ Prot Agency Info Dept (1990)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	水域	生分解 (好氣的)					88 %[within 4 hours]									experimental result	acclimated mixed bacterial culture	×		Davis L et al; Indus Wastes 25: 26-34 (1979)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	水域	生分解 (好氣的)				23~69 日 [winter temperatur e condition]					その他,static die- away method					experimental result	a static die-away method	×	NPE1-18	Kvestak R, Ahel M; Arch Environ Contam Toxicol 29: 551-56 (1995)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	水域	生分解 (好氣的)				2.5~35 日 [summer temperatur e conditions]					その他,static die- away method					experimental result	a static die-away method	×	NPE1-18	Kvestak R, Ahel M; Arch Environ Contam Toxicol 29: 551-56 (1995)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	HSDB 水域	生分解 (好氣的)					90 %[in 12 days]									experimental result	inoculation with sewage	×	NPE8, 10, 14, 16, 30	Rudling L, Solyom P; Wat Res 8: 115-19 (1974)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	水域	生分解 (好氣的)					64 %[for the 5 ethoxylate unit compound at 3 mg/L after 14 days]				その他,BOD test,					experimental result	activated sludge	×	NPE5	Urano K, Saito M; Chemosphere 14: 1333-42 (1985)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	水域	生分解 (好氣的)					57 %[for the 5 ethoxylate unit compound at 10 mg/L after 14 days]				その他,BOD test,					experimental result	activated sludge	×	NPE5	Urano K, Saito M; Chemosphere 14: 1333-42 (1985)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	水域	生分解 (好氣的)					68 %[for the 5 ethoxylate unit compound at 30 mg/L after 14 days]				その他,BOD test,					experimental result	activated sludge	×	NPE5	Urano K, Saito M; Chemosphere 14: 1333-42 (1985)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	水域	生分解 (好氣的)					33 %[for the 5 ethoxylate unit compound at 100 mg/L after 14 days]				その他,BOD test,					experimental result	activated sludge	×	NPE5	Urano K, Saito M; Chemosphere 14: 1333-42 (1985)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86000 9016-45-9	大気	OHラジカ ルとの反 応														-		×	気相中に存在する 小さいオリゴ マーはOHラジカ ルとの反応によっ て分解される	SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
86000 9016-45-9	HSDB 水域	加水分解														-		○	環境条件下で加 水分解する官能 基の欠如のため、 環境中で加水分 解を受けるとは考 えられていない	Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC: Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5, 8-12 (1990)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
86000 9016-45-9	大気	直接光分 解														-		×	波長> 290 nm(3) で吸収する発色 団を含まないた め、太陽光による 直接光分解の影 響を受けない	Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC: Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5, 8-12 (1990) SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
86000 9016-45-9	水域	生分解 (好氣的)					80 %[80% loss of linear and branched polyethylene glycol nonylphenyl ethers in 30 days using an aerobic OECD screening test]				その他,aerobic OECD screening test					experimental result		×		Fischer WK, Gerike P; Water Res 9: 1137-41 (1975)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:

NPE (親物質)

環境中運命 NPE9, NPE10に関するデータ キースタディ

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期 [day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ 該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
PACS-CASRN F等 86003 26027-38-3	41	水域	生分解 (好氣的)			23~69 日 [under winter conditions]			13 °C		その他,static die-away method					experimental result	under laboratory conditions using a static die-away method using autochthonous bacterial cultures originating from the brackish water and saline water layer of the Krka River estuary in Croatia	x	NPE1-16	Kvestak R, Ahel M; Arch Environ Contam Toxicol 29: 551-56 (1995)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86003 26027-38-3	42	水域	生分解 (好氣的)			2.5~25 日 [under summer conditions]			22.5 °C		その他,static die-away method					experimental result	under laboratory conditions using a static die-away method using autochthonous bacterial cultures originating from the brackish water and saline water layer of the Krka River estuary in Croatia	x	NPE1-16	Kvestak R, Ahel M; Arch Environ Contam Toxicol 29: 551-56 (1995)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86003 26027-38-3	43	HSDB 水域	生分解 (好氣的)				0 %[theoretical BOD in 3 weeks using an activated sludge inoculum at 30 mg/L]				化審法TG					experimental result	in the Japanese MITI test	x	NPE9-10 NPE30-50	Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 P. 7-3 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
86003 26027-38-3	44	水域	加水分解				環境条件下で加水分解する官能基がない									-		x		Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC: Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5 (1990)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
86003 26027-38-3	45	大気	直接光分解				275nmの波長の光を吸収するため、光分解の影響を受けにくい									-		x		Hidaka H et al; J Photochem Photobiol 42: 375-81 (1988) SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
86013 26571-11-9	46	水域	生分解 (好氣的)			23~69 日 [under winter conditions]			13 °C		その他,a static die-away method					experimental result		x	NPE9以外も含む	Kvestak R, Ahel M; Arch Environ Contam Toxicol 29: 551-56 (1995)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation
86013 26571-11-9	47	水域	生分解 (好氣的)			2.5~25 日 [under summer conditions]			22.5 °C		その他,a static die-away method					experimental result		x	NPE9以外も含む	Kvestak R, Ahel M; Arch Environ Contam Toxicol 29: 551-56 (1995)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation
86013 26571-11-9	48	水域	生分解 (好氣的)				0%				化審法TG					experimental result		x	NPE9以外も含む	Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 P. 7-3 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation

NPE (親物質)

環境中運命

NPE9、NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

PACS-CASRN
F等

追加

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期 [day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ-該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
49 Kvestak (1995)	水域	生分解(好氣的)	0.02 (1/日) ~ 0.28 (1/日) 算術平均値 0.11 (1/日)			6.1 日		6.1			その他,static die-away method					experimental result	a static die-away method	○	EO範囲1~18 (平均EO付加モル数10) のNPE水深0.5 mの速度定数 (1/日): 0.02、0.03、0.03、0.07、0.17、0.17、0.28 からレニウスプロットで求めた20°Cの値0.11を半減期算出に利用	Kvestak R, Ahel M; Arch Environ Contam Toxicol 29: 551-56 (1995)	
50 MOE初期評価	水域	生分解(好氣的)					0 %[ポリオキシエチレン=ノニルフェニル=エーテル]BOD]				記載なし					experimental result		×	NPE9-10	(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/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在).	002_p.1
51 MOE初期評価	水域	生分解(好氣的)					[ポリオキシエチレン=ノニルフェニル=エーテル]UV-VIS]負の値]				記載なし					experimental result		×	NPE9-10 負の値の値を得た	(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/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在).	002_p.1
52	水域	生分解(好氣的)					10.3 %[ポリオキシエチレン=ノニルフェニル=エーテル]TOC]				記載なし					experimental result		×	NPE30-50	(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/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在).	002_p.1
53	水域	生分解(好氣的)					0 %[ポリオキシエチレン=p-ノニルフェニルエーテル]BOD]									experimental result		×	NPE30-50	(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/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在).	002_p.1
54	水域	生分解(好氣的)					[ポリオキシエチレン=p-ノニルフェニルエーテル]UV-VIS]負の値]									experimental result		×	NPE30-50 負の値の値を得た	(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/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在).	002_p.1
55 MOE初期評価	水域	生分解(好氣的)					14.3 %[ポリオキシエチレン=p-ノニルフェニルエーテル]TOC]									experimental result		×	NPE9-10	(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/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在).	002_p.1
56	水域	生分解(好氣的)					本物質はアルキル基の微生物分解は受けにくい为好氣的またはエトキシ基の側から生分解が進行し、好氣的分解によりノニルフェノールジエトキシレートやノニルフェノールモノエトキシレートが生成し、さらに嫌氣的分解によりノニルフェノールが生成するとされている。									-		×		磯部友彦、高田秀重(1998): 水環境中におけるノニルフェノールの挙動と環境影響. 水環境学会誌21(4):203-208.	002_p.2
57	水域	生分解(嫌氣的)					本物質はアルキル基の微生物分解は受けにくい为好氣的またはエトキシ基の側から生分解が進行し、好氣的分解によりノニルフェノールジエトキシレートやノニルフェノールモノエトキシレートが生成し、さらに嫌氣的分解によりノニルフェノールが生成するとされている。									-		×		磯部友彦、高田秀重(1998): 水環境中におけるノニルフェノールの挙動と環境影響. 水環境学会誌21(4):203-208.	002_p.2
58	大気	OHラジカルとの反応		100E-12 cm^3/mole cule/sec	3E+05~3E+06 molecule/cm^3	0.61~6.1 時間		4.86E-02			AOPWIN					estimated by calculation		×	代表物質のSMILESを用いた便宜的な推計	U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92. (反応速度定数) Howard, P.H. et al. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv. (OH ラジカル濃度)	002_p.2

NPE (親物質)

環境中運命

NPE9、NPE10に関するデータ

キースタディ

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期 [day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ 該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
PACS F等 CASRN 86003 26027-38-3	水域	生分解 (好氣的)					0 %[BOD]				記載なし					experimental result		×		(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/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在).	p.1
86003 26027-38-3	水域	生分解 (好氣的)					[負の値][UV-VIS]				記載なし					experimental result		×		(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/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在).	p.1
86003 26027-38-3	水域	生分解 (好氣的)					14.3 %[TOC]				記載なし					experimental result		×		(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/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2007.3.16 現在).	p.1
86000 9016-45-9	NITE初期リスク 評価書	水域 生分解 (好氣的)					1 %[生物化学的酸素消費量 (BOD)測定]				化審法TG					experimental result		×	NPE30-50	通商産業省 (1982) 通商産業広報 1982年12月28日, 製品評価技術 基盤機構 化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用)	p.5
86000 9016-45-9		水域 生分解 (好氣的)					2 %[全有機炭素(TOC)測定]				化審法TG					experimental result		×	NPE30-50	通商産業省 (1982) 通商産業広報 1982年12月28日, 製品評価技術 基盤機構 化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用)	p.5
86000 9016-45-9		水域 生分解 (好氣的)					2 %[高速液体クロマトグラフ (HPLC)測定]				化審法TG					experimental result		×	NPE30-50	通商産業省 (1982) 通商産業広報 1982年12月28日, 製品評価技術 基盤機構 化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用)	p.5
86000 9016-45-9		水域 生分解 (好氣的)					0 %[ガスクロマトグラフ(GC) 測定]				化審法TG					experimental result		×	NPE30-50	通商産業省 (1982) 通商産業広報 1982年12月28日, 製品評価技術 基盤機構 化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用)	p.5
86000 9016-45-9		水域 生分解					14~65 %[二酸化炭素生成量測 定]				その他,生分解性試験					experimental result		×		Hughes, H.W., Peterson, D.R. and Markarian, R.K. (1989) Comparative biodegradability of linear and branched alcohol ethoxylates. Presented at the American Oil Chemists' Society Annual Meeting, May 3-7, Cincinnati. (Talmage, 1994 から引用). Kravetze, L., Salanitro, J.P., Dorn, P.B and Guon, K.F. (1991) Influence of hydrophobe type and extent of branching on environmental response factors of nonionic surfactants. J. Am. Oil Chem. Soc., 67, 400-405.	p.5-6
86000 9016-45-9	NITE初期リスク 評価書	水域 生分解					70 %[二酸化炭素量測定]				その他,生分解性試験					experimental result		×	NPE9	Staples,C.A., Naylor, C.G., Williams, J.B. and Gledhill, W.E. (2001) Ultimate biodegradation of alkylphenol ethoxylate surfactants and their biodegradation intermediates. Environ. Toxicol. Chem., 20, 2450-2455.	p.6
86000 9016-45-9		水域 生分解					59 %[二酸化炭素量測定]				その他,生分解性試験					experimental result		×	NPE1.5	Staples,C.A., Naylor, C.G., Williams, J.B. and Gledhill, W.E. (2001) Ultimate biodegradation of alkylphenol ethoxylate surfactants and their biodegradation intermediates. Environ. Toxicol. Chem., 20, 2450-2455.	p.6
86010 68412-54-4	ECHA	大気 OHラジカルとの反応		49.2915E- 12 cm^3/mole cule/sec	1.5E6 molecule/c m^3[mean OH radical concentrati on]	0.189 日		0.1085047			AOPWIN		no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		×	NOE1-6のそれぞれ の半減期の平均値	AopWin v1.92 (EPIWEB v 4.0), U.S. Environmental Protection Agency, 2009, (EPIWEB v 4.0) US EPA. [2009]. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.00. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.	Phototransformati on in air

NPE (親物質)

環境中運命 NPE9, NPE10に関するデータ
キースタディ

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期 [day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ 該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
PACS- CASRN F等 86010 68412-54-4	水域	生分解 (好氣的)					45.3 %[CO2 evolution]28 d[NPE-1]		22±2 °C	7.4~7.6	その他,OECD Guideline 301 B		yes	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE1	study report, Unnamed, 1999 Ultimate biodegradation of alkylphenol ethoxylate surfactants and their biodegradation intermediates, Staples CA, Naylor CG, Williams JB, Gledhill WE, 2001, Environ. Toxicol. Chem. 20(11):2450-2455	Read-across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.003
86010 68412-54-4	水域	生分解 (好氣的)					58.7 %[CO2 evolution]35 d[NPE-1]		22±2 °C	7.4~7.6	その他,OECD Guideline 301 B		yes	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE1	study report, Unnamed, 1999 Ultimate biodegradation of alkylphenol ethoxylate surfactants and their biodegradation intermediates, Staples CA, Naylor CG, Williams JB, Gledhill WE, 2001, Environ. Toxicol. Chem. 20(11):2450-2455	Read-across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.003
86010 68412-54-4	ECHA 水域	生分解 (好氣的)					74.8 %[CO2 evolution]35 d[NPE-9]		22±2 °C	7.4~7.6	その他,OECD Guideline 301 B		yes	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE9	study report, Unnamed, 1999 Ultimate biodegradation of alkylphenol ethoxylate surfactants and their biodegradation intermediates, Staples CA, Naylor CG, Williams JB, Gledhill WE, 2001, Environ. Toxicol. Chem. 20(11):2450-2455	Read-across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.003
86010 68412-54-4	ECHA 水域	生分解 (好氣的)					79.5 %[CO2 evolution]35 d[NPE-9]		22±2 °C	7.4~7.6	その他,OECD Guideline 301 B		yes	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE9	study report, Unnamed, 1999 Ultimate biodegradation of alkylphenol ethoxylate surfactants and their biodegradation intermediates, Staples CA, Naylor CG, Williams JB, Gledhill WE, 2001, Environ. Toxicol. Chem. 20(11):2450-2455	Read-across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.003
86010 68412-54-4	底質	生分解 (好氣的)				85 日 [Aerobic conditions]							no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE4	Degradation of nonylphenol ethoxylates in estuarine sediment under aerobic and anaerobic conditions., Ferguson PL and Brownawell BJ, 2003, Environ. Toxicol. Chem. 22(6):1189-1199.	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001
86010 68412-54-4	底質	生分解 (好氣的)				287 日 [Anaerobic conditions]							no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE4	Degradation of nonylphenol ethoxylates in estuarine sediment under aerobic and anaerobic conditions., Ferguson PL and Brownawell BJ, 2003, Environ. Toxicol. Chem. 22(6):1189-1199.	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001
86010 68412-54-4	底質	生分解 (好氣的)				5.8 日 [Aerobic conditions]			20 °C				no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NP	Degradation of five selected endocrine-disrupting chemicals in seawater and marine sediment, Ying GG and Kookana RS, 2003, Environ. Sci. Technol.	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.002
86010 68412-54-4	底質	生分解 (好氣的)				>70 日 [Under anaerobic conditions, little or no degradatio n]			20 °C				no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	対象のデータ ではない	Degradation of five selected endocrine-disrupting chemicals in seawater and marine sediment, Ying GG and Kookana RS, 2003, Environ. Sci. Technol.	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.002
86010 68412-54-4	水域	生分解 (好氣的)					99 %[Test mat. analysis]4 d]						no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×		Aerobic biodegradation studies of nonylphenol ethoxylates in river water using liquid chromatography - electrospray tandem mass spectrometry, Jonkers N, Knepper TP and de Voogt P, 2001, Environ. Sci. Technol. 35:335-340	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.004

NPE (親物質)

環境中運命 NPE9、NPE10に関するデータ
NPE9、NPE10に関するデータ
キースタディ

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期 [day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ 該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
PACS- CASRN F等 86010 68412-54-4	79	土壌	生分解			0.9~13.2 日[in Sediment A]			21 °C				no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x		Isomer-specific biodegradation of nonylphenol in river sediments and structure-biodegradability relationship, Lu Z and Gan J, 2013, Environ. Sci. Technol. 48:1008-1014	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.005
86010 68412-54-4	80	土壌	生分解			15.1~20.1 日[in Sediment B]			21 °C				no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x		Isomer-specific biodegradation of nonylphenol in river sediments and structure-biodegradability relationship, Lu Z and Gan J, 2013, Environ. Sci. Technol. 48:1008-1014	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.005
86010 68412-54-4	81	ECHA	水域	生分解 (好氣的)		23~69 日			13 °C				no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x	NPE10(1~18の 範囲を混合、平 均10)	Biotransformation of nonylphenol polyethoxylate by estuarine mixed bacterial cultures, Kvestak R and Ahel M, 1995, Arch. Environ. Contam. 29:551-556	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.006
86010 68412-54-4	82	ECHA	水域	生分解 (好氣的)		2.5~35 日			22.5 °C				no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x	NPE10(1~18の 範囲を混合、平 均10)	Biotransformation of nonylphenol polyethoxylate by estuarine mixed bacterial cultures, Kvestak R and Ahel M, 1995, Arch. Environ. Contam. 29:551-556	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.006
86010 68412-54-4	83		水域	生分解			50 %[Radiochem. meas. 8 wk In sea water without sediment]		11±2 °C		その他,OECD Guideline 308		no data	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x	NP	Biodegradation of 4-nonylphenol in seawater and sediment, Ekelund R, Granmo A, Magnussen K and Berggren M, 1993, Environ. Poll. 79:59-61	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.007
86010 68412-54-4	84		水域	生分解			40 %[Radiochem. meas. 8 wk In sea water with sediment]		11±2 °C		その他,OECD Guideline 308		no data	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x	NP	Biodegradation of 4-nonylphenol in seawater and sediment, Ekelund R, Granmo A, Magnussen K and Berggren M, 1993, Environ. Poll. 79:59-61	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.007
86010 68412-54-4	85		水域	生分解			50 %[Radiochem. meas. 8 wk In sea water without sediment]		11±2 °C		その他,OECD Guideline 308		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x	NP	publication, Unnamed, 1993	Read-across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.008
86010 68412-54-4	86		水域	生分解			40 %[Radiochem. meas. 8 wk In sea water with sediment]		11±2 °C		その他,OECD Guideline 308		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x	NP	publication, Unnamed, 1993	Read-across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.008
86010 68412-54-4	87	ECHA	水域	生分解 (好氣的)			40 %[Converted to 14CO2 128 d]						no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x	NPE9	Biodegradation of (14C) ring-labeled nonylphenol ethoxylate, Naylor CG, Staples CA, Klecka GM, Williams JB, Varineau PT and Cady C, 2006, Arch. Environ. Contam. Toxicol. 51:11-20	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.009
86010 68412-54-4	88	ECHA	水域	生分解 (好氣的)			21 %[Incorporated into biomass 128 d]						no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		x	NPE9	Biodegradation of (14C) ring-labeled nonylphenol ethoxylate, Naylor CG, Staples CA, Klecka GM, Williams JB, Varineau PT and Cady C, 2006, Arch. Environ. Contam. Toxicol. 51:11-20	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.009

NPE (親物質)

環境中運命 NPE9、NPE10に関するデータ
 キースタディ

収集データ

PACS F等	CASRN	情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期 [day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ 該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
	86010 68412-54-4	ECHA	水域	生分解 (好氣的)					87~98 %[Primary degradation]128 d]						no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE9	Biodegradation of (14C) ring-labeled nonylphenol ethoxylate, Naylor CG, Staples CA, Klecka GM, Williams JB, Varineau PT and Cady C, 2006, Arch. Environ. Contam. Toxicol. 51:11-20	Read-across Subs WoE Biodegradation in water and sediment: simulation tests.009
	86010 68412-54-4		土壌	生分解 (好氣的)					89 %[Test mat. analysis]at 100 ppm concentration]40 d]		25 °C		その他,OECD Guideline 307		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×		publication, Unnmaed, 1988	Read-across Subs Key Biodegradation in soil.001
	86010 68412-54-4		土壌	生分解 (好氣的)					62 %[Test mat. analysis]at 1000 ppm concentration]40 d]		25 °C		その他,OECD Guideline 307		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×		publication, Unnmaed, 1988	Read-across Subs Key Biodegradation in soil.001
	86010 68412-54-4		土壌	生分解					49.7~63.7 %[NP]after two months]		15 °C				no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NP	Mineralisation of organic contaminants in sludge-amended mixtures, Gejlsbjerg B, Klinge C and Madsen T, 2001, Environ. Toxicol. Chem. 20(4):698-705	Read-across Subs WoE Biodegradation in soil.004
	86010 68412-54-4		土壌	生分解					55.2~66.4 %[NPE-2]after two months]		15 °C				no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE2	Mineralisation of organic contaminants in sludge-amended mixtures, Gejlsbjerg B, Klinge C and Madsen T, 2001, Environ. Toxicol. Chem. 20(4):698-705	Read-across Subs WoE Biodegradation in soil.004
	86010 68412-54-4		土壌	生分解 (好氣的)					6~10 %[In viable soils, 6-10% of NP mineralized to14CO2 within 150 days]						no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NP	Mineralisation and plant uptake of 14C-labeled nonylphenol, nonylphenol tetraethoxylate and nonylphenol nonylethoxylate in biosolids/soil systems planted with crested wheatgrass, Dettenmaier E and Doucette WJ, 2007, Environ. Toxicol. Chem. 26(2):193-200	Read-across Subs WoE Biodegradation in soil.005
	86010 68412-54-4		土壌	生分解 (好氣的)					12~29 %[NPE-4 mineralized to14CO2 within 150 days]						no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE4	Mineralisation and plant uptake of 14C-labeled nonylphenol, nonylphenol tetraethoxylate and nonylphenol nonylethoxylate in biosolids/soil systems planted with crested wheatgrass, Dettenmaier E and Doucette WJ, 2007, Environ. Toxicol. Chem. 26(2):193-200	Read-across Subs WoE Biodegradation in soil.005
	86010 68412-54-4	ECHA	土壌	生分解 (好氣的)					174~28 %[NPE-9 mineralized to14CO2 within 150 days]						no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NPE9	Mineralisation and plant uptake of 14C-labeled nonylphenol, nonylphenol tetraethoxylate and nonylphenol nonylethoxylate in biosolids/soil systems planted with crested wheatgrass, Dettenmaier E and Doucette WJ, 2007, Environ. Toxicol. Chem. 26(2):193-200	Read-across Subs WoE Biodegradation in soil.005
	86010 68412-54-4		水域	光分解	0.92[1/時間][Rate constant (for indirect photolysis): ca. 0.92 other: h^-1 (for NP)]			15~20 時間							no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NP, NPE1	Photochemical degradation of nonylphenol and nonylphenol polyethoxylates in natural waters, Ahel M, Scully FE, Hoigne J and Giger W, 1994, Chemosphere; 28(7): 1361-8	Phototransformation in water
	86010 68412-54-4		水域	生分解 (好氣的)					62 %[O2 consumption]28 d]		22 °C		その他,OECD Guideline 301 F		yes	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		×	NP	Measuring the biodegradability of nonylphenolether carboxylates, octylphenol ether carboxylates, and nonylphenol, Staples CA, William JB, Blessing RL and Varineau PT, 1999, Chemosphere 38(9):2029-2039	Read-across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.001

NPE (親物質)

分解性 NPE9、NPE10に関するデータ
 キースタディ

収集データ

PACS- CASRN
F 等

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 86013 26571-11-9	HSDB	0%	O ₂ consumption		化審法TG				experimental result		NPE9以外も含む	Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 P. 7-3 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation
2 86000 9016-45-9	NITE初期リスク評価書	not readily biodegradable	2% O ₂ consumption TOC		化審法TG	-	-	-	-		NPE30-50	通商産業省 (1982) 通商産業広報1982年12月28日, 製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用).	p.5
3 86000 9016-45-9		not readily biodegradable	2% O ₂ consumption HPLC		化審法TG	-	-	-	-		NPE30-50	通商産業省 (1982) 通商産業広報1982年12月28日, 製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用).	p.5
4 86000 9016-45-9		not readily biodegradable	0% O ₂ consumption GC		化審法TG	-	-	-	-		NPE30-50	通商産業省 (1982) 通商産業広報1982年12月28日, 製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用).	p.5
5 86000 9016-45-9		not readily biodegradable	1% O ₂ consumption BOD		化審法TG	-	-	-	-		NPE30-50	通商産業省 (1982) 通商産業広報1982年12月28日, 製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用).	p.5
6 86000 9016-45-9	ECHA	inherently biodegradable	58.70% CO ₂ evolution		OECD TG 301B	yes	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		68412-54-4の単票から移動	1999,1999.03.10.	H25_86010_68412544_REACH登録情報_001 >Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.002
7 86010 68412-54-4		inherently biodegradable	58.70% CO ₂ evolution		OECD TG 301B	yes	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		対象の物質ではない (9016-45-9、NPE1.5)	1999,1999.03.10.	Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.002
8 86010 68412-54-4		inherently biodegradable	21 % [Innoculum Day 0 (Cas Test)] O ₂ consumption		OECD TG 301D	no	4: not assignable		experimental result			1998,1998.06.22.	Exp NS Biodegradation in water: screening tests.001

NPE (親物質)

分解性 NPE9、NPE10に関するデータ
 キースタディ

収集データ

PACS- CASRN
F等

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
86010 68412-54-4	inherently biodegradable	112 % [Inoculum Day 0 (Cas Test) Extended Result]	O_2 consumption		OECD TG 301D	no	4: not assignable		experimental result			1998,1998.06.22.	Exp NS Biodegradation in water: screening tests.001
86010 68412-54-4	inherently biodegradable	52 % [Inoculum Day 14 (cas Test)]	O_2 consumption		OECD TG 301D	no	4: not assignable		experimental result			1998,1998.06.22.	Exp NS Biodegradation in water: screening tests.001
86010 68412-54-4	readily biodegradable	62 % [\geq 54.7 \leq 68.4] [Average 62% degradation]	O_2 consumption		OECD TG 301F	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		対象の物質ではない (84852-15-3)	1999	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.003
86000 9016-45-9	既存点検事業	1.70%	その他,LC		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE40		002_p.1
86000 9016-45-9	既存点検事業	1.30%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE40		002_p.1
86000 9016-45-9	追加	0.6 % [UV 225nm]	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE40		002_p.1
86000 9016-45-9	追加	0.2 % [UV 275nm]	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE40		002_p.1
86000 9016-45-9	追加	1.60%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE40		002_p.1
追加	追加	5.20%	その他,LC		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE9.5		
追加	追加	0.00%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE9.5		
追加	追加	8.8 % [UV 225nm]	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE9.5		
追加	追加	6.8 % [UV 275nm]	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE9.5		
追加	追加	9.00%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE9.5		
追加	追加	既存点検事業	%[負の値を得た]	Test mat. analysis	化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE40		
追加	追加	0%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE40		
追加	追加	10.30%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE40		
追加	追加	%[負の値を得た]	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE9.5		
追加	追加	0%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE9.5		
追加	追加	14.30%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result		NPE9.5		

NPE2(変化物)

logPow

NPE2に関するデータ
キースタディ

PACS_F 等 CASRN	情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキース タディの該	値の種類	値の種類 の詳細	信頼性ラン ク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号 等
追加	1 Canadaの 元文献 (Ahel, M., Giger, W. (1993))	4.21 ± 0.18	4.21	20.5±1°C		OECD TG 107 フラス コ振とう法						2A	○	NPE2	Ahel, M. and W. Giger (1993): Partitioning of alkyphenols and alkyphenol polyethoxylates between water and organic solvents. Chemosphere. 26: 1471-1478.	
86000 9016-45-9	2 MOE初期 評価	3.59[NPE9]	3.59							-		2B	×	NPE9	Ahel, M. and W. Giger (1993): Partitioning of alkyphenols and alkyphenol polyethoxylates between water and organic solvents. Chemosphere. 26: 1471-1478.	001_p.1
86000 9016-45-9	3 ECHA	3.7	3.7	25 °C	[pH value is unknown]	OECD TG 117		2: reliable with restrictio ns	key study	experiment al result		1B	×		study report, Unnamed, 2012	Exp Key Partition coefficient. 002
86000 9016-45-9	4	4.48	4.48	[temperatur e and pH are not available]	[temperatur e and pH are not available]	KOWWIN		2: reliable with restrictio ns	key study	(Q)SAR		4C	×		KowWin estimated, US Environmental Protection Agency's Office of Pollution Prevention and Toxics and Syracuse Research Corporation (SRC), 2000, EPISUIT4.1.	QSAR Key Partition coefficient. 001
86003 26027-38-3	5 HSDB	4.48[estima ted physical properties based upon 5 ethoxylates]	4.48							estimated by calculation		4C	×	NPE5	US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Oct 25, 2012: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm	Chemical/P hysical Properties: > Octanol/W ater Partition Coefficient:
86010 68412-54-4	6 ECHA	5.39[Avera ge mean value]	5.39			KOWWIN	no	2: reliable with restrictio ns	key study	estimated by calculation		4C	×	直鎖NPE9のlogPowより低い 値だった	Modeling, Unnamed, 2010	Calc Key Partition coefficient. 002

NPE2(変化物)

Koc

NPE2に関するデータ
キースタディ

PACS_F 等 CASRN

追加

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86001 20427-84-3

86003 26027-38-3

86003 26027-38-3

86009 51938-25-1

86010 68412-54-4

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキース タディの該	値の種類	値の種類 の詳細	信頼性ラン ク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号 等
EPI Suite	Koc	642.2	642.2				KOCWIN Log Kow法 (logPow=4.21)				(Q)SAR		2C	○	NPE2 6つの異性体での値: いずれも642.2		
HSDB	Koc	6.1	6.1			sediment					experiment al result		2B	×		Urano K et al; Chemosphere 13: 293-300 (1984)	Environme ntal Fate & Exposure: > Soil Adsorption/ Mobility:
MOE初期 評価	Koc	6.1[6EO]	6.1								-		2B	×	NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300.	002_p.2
NITE初期 リスク評価 書	Koc	6.1[NPE6]	6.1								experiment al result		2B	×	NPE6	U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2003) HSDB, Hazardous Substances Data Bank. (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引 用)	p.2
MOE初期 評価	Koc	6.1[6EO]	6.1										2B	×	NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300.	p.2、1. 物 質に関する 基本的事項 (3) 環境運 命に関する 基礎的事項
HSDB	Koc	1300[base d upon 5 ethoxylates]	1300								estimated by calculation		4C	×	NPE5	SRC	Environme ntal Fate & Exposure: > Soil Adsorption/ Mobility:
MOE初期 評価	Koc	6.1	6.1			-	-	-	-	-	-		2B	×	6.1 (6EO) NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300..	p.2
MOE初期 評価	Koc	6.1	6.1			-	-	-	-	-	-		2B	×	6.1 (6EO) NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300..	p.2
ECHA	Koc	2661 L/kg	2661				KOCWIN	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	NOE1-6のそれぞれの Kocの平均値 NPE1:3049 NPE2:2480 NPE3:2017 NPE4:1641 NPE5:1335 NPE6:1086	KOCWIN v2.00 (EPIWEB v 4.0), U.S. Environmetal Protection Agency, 2009, US EPA. [2009]. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.00. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.	Adsorption / desorption

NPE1 (変化物)

logPow NPE1に関するデータ
 キースタディ

PACS_F 等 CASRN

追加

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキース タディの該	値の種類	値の種類 の詳細	信頼性ラン ク (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号 等
Canadaの 元文献 (Ahel, M., Giger, W. (1993))	4.17 ± 0.15	4.17	20.5±1°C		OECD TG 107 フラス コ振とう法						2A	○	NPE1	Ahel, M. and W. Giger (1993): Partitioning of alkylphenols and alkylphenol polyethoxylates between water and organic solvents. Chemosphere. 26: 1471-1478.	
MOE初期 評価	3.59[NPE9]	3.59							-		2B	×	NPE9	Ahel, M. and W. Giger (1993): Partitioning of alkylphenols and alkylphenol polyethoxylates between water and organic solvents. Chemosphere. 26: 1471-1478.	001_p.1
ECHA	3.7	3.7	25 °C	[pH value is unknown]	OECD TG 117		2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		1B	×		study report, Unnamed, 2012	Exp Key Partition coefficient. 002
ECHA	4.48	4.48	[temperatur e and pH are not available]	[temperatur e and pH are not available]	KOWWIN		2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR		4C	×		KowWin estimated, US Environmental Protection Agency's Office of Pollution Prevention and Toxics and Syracuse Research Corporation (SRC), 2000, EPISUIT4.1.	QSAR Key Partition coefficient. 001
HSDB	4.48[estim ated physical properties based upon 5 ethoxylates]	4.48							estimated by calculation		4C	×	NPE5	US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Oct 25, 2012: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitd1.htm	Chemical/ Physical Properties: > Octanol/W ater Partition Coefficient:
ECHA	5.39[Avera ge mean value]	5.39			KOWWIN	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	直鎖NPE9 のlogPow より低い値 だった	Modeling, Unnamed, 2010	Calc Key Partition coefficient. 002

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86003 26027-38-3

86010 68412-54-4

NPE1(変化物)

Koc

NPE1に関するデータ
キースタディ

PACS_F 等 CASRN

追加

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86000 9016-45-9

86003 26027-38-3

86003 26027-38-3

86009 51938-25-1

86010 68412-54-4

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価I)	キースタディ該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
EPI Suite	Koc	751.8	751.8				KOCWIN Log Kow法 (logPow=4.17)				(Q)SAR		2C	○	NPE1 6つの異性体での値: いずれも 751.8		
HSDB	Koc	6.1	6.1			sediment					experimental result		2B			Urano K et al; Chemosphere 13: 293-300 (1984)	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
MOE初期評価	Koc	6.1[6EO]	6.1								-		2B		NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300.	002_p.2
NITE初期リスク評価書	Koc	6.1[NPE6]	6.1								experimental result		2B		NPE6	U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2003) HSDB, Hazardous Substances Data Bank. (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用)	p.2
HSDB	Koc	1300[based upon 5 ethoxylates]	1300								estimated by calculation		4C		NPE5	SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
MOE初期評価	Koc	6.1	6.1			-	-	-	-	-	-		2B		6.1 (6EO) NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300..	p.2
MOE初期評価	Koc	6.1	6.1			-	-	-	-	-	-		2B		6.1 (6EO) NPE6	K. Urano et al. (1984): Adsorption of Surfactants on Sediments, Chemosphere, 13(2): 293-300..	p.2
ECHA	Koc	2661 L/kg	2661				KOCWIN	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C		NOE1-6のそれぞれのKocの平均値 NPE1:3049 NPE2:2480 NPE3:2017 NPE4:1641 NPE5:1335 NPE6:1086	KOCWIN v2.00 (EPIWEB v 4.0), U.S. Environmental Protection Agency, 2009, US EPA. [2009]. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.00. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.	Adsorption / desorption

NP(変化物)
 logPow キースタディ

PACS_F 等 CASRN

情報源名	値	統一表記	測定条件温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク(評価I)	キースタディ該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
追加	Canada	4.2-4.48	4.48	20.5±1°C					experimental result		2A	○	主にp体、分岐	Ahel, M., Giger, W. (1993)	
追加	AIST	4.48	4.48	20.5±1°C	OECD TG 107 フラスコ振とう法				experimental result		2A	○	主にp体、分岐	Ahel, M., Giger, W. (1993)	
追加		5.76	5.76	40°C	HPLC法				experimental result		2A	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	
追加		5.99	5.99		KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	p体		
86031 104-40-5	HSDB	5.76	5.76	40°C	HPLC法				experimental result		2B	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient
86031 104-40-5	Mackay	4.2	4.2						estimated by calculation	calculated-π substituent const. or fragment const.	4C	×		McLeese, D.W., Zitko, V., Sergent, D.B., Burridge, L., Metcalfe, C.D. (1981) Lethality and accumulation of alkylphenols in aquatic fauna. Chemosphere 10, 723-730.	p.2862
86031 104-40-5		4.1	4.1						不明		2B	×		Geyer, H., Sheehan, P., Kotzias, D., Freitag, D., Körte, F. (1982) Prediction of ecotoxicological behaviour of chemicals: relationship between physico-chemical properties and bioaccumulation of organic chemicals in the mussel Mytilus edulis. Chemosphere 11, 1121-1134.	p.2862
86031 104-40-5		5.90[selected]	5.9						不明		2B	×		Yoshida, K., Mizuno, T., Ose, Y., Sato, T. (1986) The estimation for toxicity of chemicals on fish by physico-chemical properties. Chemosphere 15, 195-203.	p.2862
86031 104-40-5	Mackay	5.76	5.76	40°C	HPLC法				experimental result		2B	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	p.2862
86031 104-40-5	Mackay	4.48±0.12	4.48	20.5±1°C	OECD TG 107 フラスコ振とう法				experimental result		2B	○	主にp体、分岐	Ahel, M., Giger, W. (1993)	p.2862
86031 104-40-5		6.36	6.36						estimated by calculation	calculated-CLOGP 3.51	4C	×		Jaworska, J.S., Schultz, T.W. (1993) Quantitative relationships of structure-activity and volume fraction for selected nonpolar and polar narcotic chemicals. SAR and QSAR in Environ. Res. 1, 3-19.	p.2862
86031 104-40-5		6.36	6.36						不明		2B	×		Kaiser, K.L.E. (1993) COMPUTOX Database, National Water Research Institute, Burlington, Ontario, Canada.	p.2863
86031 104-40-5	Mackay	5.76	5.76	40°C	HPLC法				experimental result		2B	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	p.2863
86031 104-40-5	NITE初期リスク評価書	5.76[p-n-ノニルフェノール]	5.76	40°C	HPLC法				experimental result		2B	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	p.2
86031 104-40-5		5.99[p-n-ノニルフェノール]	5.99		KOWWIN				(Q)SAR		4C	×	p体		p.2
86031 104-40-5	PhysProp	5.76	5.76	40°C	HPLC法				experimental result		2B	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	
86031 104-40-5	ECHA	5.76	5.76	40°C	HPLC法				experimental result		4A	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	Partition coefficient
86032 136-83-4	PhysProp	5.76	5.76	40°C	HPLC法				experimental result		2B	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	
86033 139-84-4	PhysProp	5.61	5.61	40°C	HPLC法				experimental result		2B	○	m体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	
86037 25154-52-3	HSDB	5.71[average of 3 isomers]	5.71						不明		2B	×	3つのアイソマーの平均値	Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society, 1995, p. 137	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient
86037 25154-52-3	Mackay	4.2	4.2						estimated by calculation	calculated-π substituent const. or fragment const.	4C	×		McLeese, D.W., Zitko, V., Sergent, D.B., Burridge, L., Metcalfe, C.D. (1981) Lethality and accumulation of alkylphenols in aquatic fauna. Chemosphere 10, 723-730.	p.2862

NP(変化物)
 logPow キースタディ

PACS_F 等 CASRN

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
86037 25154-52-3	4.1	4.1							不明		2B	×		Geyer, H., Sheehan, P., Kotzias, D., Freitag, D., Körte, F. (1982) Prediction of ecotoxicological behaviour of chemicals: relationship between physico-chemical properties and bioaccumulation of organic chemicals in the mussel <i>Mytilus edulis</i> . <i>Chemosphere</i> 11, 1121-1134.	p.2862
86037 25154-52-3	5.90[selected]	5.9							不明		2B	×		Yoshida, K., Mizuno, T., Ose, Y., Sato, T. (1986) The estimation for toxicity of chemicals on fish by physico-chemical properties. <i>Chemosphere</i> 15, 195-203.	p.2862
86037 25154-52-3	Mackay	5.76	40°C		HPLC法				experimental result		2B	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	p.2862
86037 25154-52-3	Mackay	4.48±0.12	20.5±1°C		OECD TG 107 フラスコ振とう法				experimental result		2B	○	主にp体、分岐	Ahel, M., Giger, W. (1993)	p.2862
86037 25154-52-3		6.36							estimated by calculation	calculated-CLOGP 3.51	4C	×		Jaworska, J.S., Schultz, T.W. (1993) Quantitative relationships of structure-activity and volume fraction for selected nonpolar and polar narcotic chemicals. SAR and QSAR in <i>Environ. Res.</i> 1, 3-19.	p.2862
86037 25154-52-3		6.36							不明		2B	×		Kaiser, K.L.E. (1993) COMPUTOX Database, National Water Research Institute, Burlington, Ontario, Canada.	p.2863
86037 25154-52-3		5.76							不明		2B	×		Sangster, J. (1993) LOGKOW Databank, Sangster Research Laboratory, Montreal, Quebec. Hansch, C., Leo, A.J., Hoekman, D. (1995) Exploring QSAR, Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington, DC.	p.2863
86037 25154-52-3	MOE初期評価	3.28 (元文献 4.48)							不明		2B	×	p体 元文献(IPCS)では4.48だった	財団法人化学物質評価研究機構 (2002) >IPCS(1989)	p.168
86037 25154-52-3	NITE初期リスク評価書	5.76[p-n-ノニルフェノール]	40°C		HPLC法				experimental result		2B	○	o体、p体、直鎖	ITOKAWA,H ET AL. (1989)	p.2
86037 25154-52-3		5.99[p-n-ノニルフェノール]			KOWWIN				(Q)SAR		4C	×	p体		p.2
86037 25154-52-3	PhysProp	5.71							不明		2B	×	3つのアイソマーの平均値	HANSCH,C ET AL. (1995); isomer avg	
86037 25154-52-3	SIDS	4.48	20.5±1°C		OECD TG 107 フラスコ振とう法				experimental result		2A	○	主にp体、分岐	Ahel, M., Giger, W. (1993)	p.11; p.13
86043 84852-15-3	PhysProp	5.92							estimated by calculation		4C	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995)	

NP(変化物)

Koc キースタディ

PACS_F 等 CASRN

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価I)	キースタディ該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
追加	EPI Suite	Koc	10290	10290			KOCWIN Log Kow法 (logPow=5.28)						2C	○	NPE2 6つの異性体での値:いずれも10290		
86037 25154-52-3	HSDB	Koc	10000[log Koc=4.00]	10000							不明		2B	×		Bronner G, Goss K; Environ Sci Technol 45: 1307-12 (2010)	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility
86037 25154-52-3		Koc	23000~489000	256000		three soils of 0.82, 8.6 and 10.2% organic carbon					experimental result		2B	×	分岐NP,p体	ECHA; Search for Chemicals. Phenol, 4-nonyl-, branched (CAS 84852-15-3) Registered Substances Dossier. European Chemical Agency. Available from, as of Jan 12, 2015: http://echa.europa.eu/	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility
86037 25154-52-3		Koc	3000~489000[with most values in the range of 10,000 to 50,000]	246000							experimental result		2B	×	様々な実験室での報告	ECHA; Search for Chemicals. Phenol, 4-nonyl-, branched (CAS 84852-15-3) Registered Substances Dossier. European Chemical Agency. Available from, as of Jan 12, 2015: http://echa.europa.eu/	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility
86037 25154-52-3		Koc	1.33E+5[for three suspended particulate matters]	133000							不明		2B	×		Hou SG et al; Chemosphere 63: 31-38 (2006)	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility
86037 25154-52-3		Koc	6.91E+4~3.98E+5[for suspended aquatic matter]	233550							不明		2B	×		Hou SG et al; Chemosphere 63: 31-38 (2006)	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility
86037 25154-52-3	NITE初期リスク評価書	Koc	60000	60000							不明		2B	×		U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2001) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD. (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用)	p.2
86037 25154-52-3	SIDS	logKoc	4.35~5.69	104712.8548		3つの地表土壌を使用	USEPA TSCA environmental fate test guidelines HPLC			-	experimental result		2B	×	値が大きすぎるとの記載あり		p.61
86037 25154-52-3		Koc	5360 L/kg	5360			その他,EUSES based on a log Kow of 4.48			-	estimated by calculation		4C	×	logKow=4.48を用いて推計		p.63
86037 25154-52-3		Koc	22000~490000[measured in various soils (Koc 22,000-490,000)]	256000						-	experimental result		2B	×	USEPA TSCA TGIに沿った試験で導出されたlogKoc=4.35~5.69のログをとった値。値が大きすぎるとの記載あり		p.63
86031 104-40-5	HSDB	Koc	32400[logPow=5.76[a regression-derived equation]	32400			KOCWIN				(Q)SAR		4C	×	logKow=5.76を用いて推計	SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility
86031 104-40-5	ECHA	Koc	38260 L/kg	38260			KOCWIN	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×		[Reference Type]: other: , Prediction model, [Title]: Adsorption by EPI (Estimation Programs Interface) Suite, [Author]: Sustainability Support Service (Europe) AB - estimated, [Year]: 2015, [Bibliographic source]: Estimation Programs Interface Suite™ United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA. version 4.1	Adsorption / desorption